NGUYỄN DUY ÁI

ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN

CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC



NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

BẢNG TUẦN HOÀN

Ký hiệu

Số hiệu nguyên tử →	6 12,01 C 2,55 Cacbon Động vật Thực vật	← Nguyên tử khối trung bình ← Độ âm điện
Tên nguyên tố →		
Công dụng Trạng thái tự nhiên →		
	$1s^22s^22p^2$	← Cấu hình electron nguyên tử

rắn, lỏng, khí } Ở nhiệt độ phòng

Chất phóng xạ

nhân tạo

KIM LOẠI CHUYỂN TIẾP - KIM LOẠI CHUYỂN TIẾP - KIM LOẠI

Nhóm / Chu kì	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	
1	1 1,008 H 2,20 Hiđro Mặt trời, Sao, nước $1s^1$							
2	3 6,94 Li 0,98 Liti Pin đồng hồ $1s^22s^1$	4 9,01 Be 1,57 Beri Lục ngọc $1s^22s^2$						
3	11 22,989 Na 0,93 Natri Sôđa [Ne] $3s^1$	12 24,31 Mg 1,31 Magie Chất diệp lục [Ne] $3s^2$						
4	19 39,10 K 0,82 Kali Phân bón [Ar] $4s^1$	20 40,08 Ca 1,00 Canxi Răng [Ar] $4s^2$	21 44,96 Sc 1,36 Scanđi Bích ngọc [Ar] $3d^14s^2$	22 47,90 Ti 1,54 Titan Máy bay [Ar] $3d^24s^2$	23 50,94 V 1,63 Vanađi Lò xo [Ar] $3d^34s^2$	24 51,996 Cr 1,66 Crom Công nghiệp chế tạo ô-tô [Ar] $3d^54s^1$	25 54,94 Mn 1,55 Mangan Máy nghiền đá [Ar] $3d^54s^2$	26 55,85 Fe 1,83 Sắt Cao ốc [Ar] $3d^64s^2$
5	37 85,47 Rb 0,82 Rubiđi Pin mặt trời [Kr] $5s^1$	38 87,62 Sr 0,95 Stronti Pháo hoa [Kr] $5s^2$	39 88,91 Y 1,22 Ytri Chất phát quang màu [Kr] $4d^15s^2$	40 91,22 Zr 1,33 Ziriconi Ngọc zircon [Kr] $4d^25s^2$	41 92,91 Nb 1,6 Niobi Tàu từ trường [Kr] $4d^45s^1$	42 95,94 Mo 2,16 Molipđen Công cụ cắt gọt [Kr] $4d^55s^1$	43 (99) Tc 1,90 Tecnexi Chẩn đoán bệnh [Kr] $4d^55s^2$	44 101,07 Ru 2,2 Ruteni Công tắc điện [Kr] $4d^75s^1$
6	55 132,91 Cs 0,79 Xesi Đồng hồ nguyên tử [Xe] $6s^1$	56 137,31 Ba 0,89 Bari Chất cản quang [Xe] $6s^2$	57* 138,91 La 1,1 Lantan Đèn hồ quang [Xe] $5d^16s^2$	72 178,49 Hf 1,3 Hafini Kiểm soát phản ứng hạt nhân [Xe]$4f^{14}5d^26s^2$	73 180,95 Ta 1,5 Tantan Dụng cụ cắt gọt [Xe]$4f^{14}5d^36s^2$	74 183,85 W 2,36 Vonfam Dây tóc bóng đèn [Xe]$4f^{14}5d^46s^2$	75 186,20 Re 1,9 Reni Bóng điện đặc biệt [Xe]$4f^{14}5d^56s^2$	76 190,20 Os 2,2 Osimi Ngòi bút [Xe]$4f^{14}5d^66s^2$
7	87 [223] Fr 0,7 Franci Đời sống ngắn [Rn] $7s^1$	88 226,03 Ra 0,9 Rađi Sơn dạ quang [Rn] $7s^2$	89** [227] Ac 1,1 Actini Nguồn notron [Rn] $6d^17s^2$	104 [261] Rf Rutherfordi	105 [262] Db Dubni	106 [266] Sg Seaborgi	107 [264] Bh Bohri	108 [277] Hs Hassi

* Họ Lantan	58 140,12 Ce 1,12 Xeri Đá lửa cho bật lửa [Xe]$4f^25d^06s^2$	59 140,91 Pr 1,13 Prazeođim Kính thợ hàn [Xe]$4f^35d^06s^2$	60 144,24 Nd 1,14 Neođim Kính thiên văn [Xe]$4f^45d^06s^2$	61 [147] Pm 1,13 Prometi Năng lượng tàu vũ trụ [Xe]$4f^55d^06s^2$
** Họ Actini	90 232,04 Th 1,3 Thori Đèn măng sông	91 231,04 Pa 1,5 Protactini Rất hiếm	92 238,03 U 1,38 Urani Năng lượng hạt nhân	93 [237] Np 1,36 Neptuni Dò notron

CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC



D.I. Mendeleep (1834 - 1907)
(Д. И. Менделеев)

CHUYỂN TIẾP - KIM LOẠI CHUYỂN TIẾP

VIIIB		IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
								[H]	2 4,003 **He** Heli Bóng bay $1s^2$
				5 10,81 **B** 2,04 Bo Thuỷ tinh chịu nhiệt $1s^22s^22p^1$	6 12,01 **C** 2,55 Cacbon Động thực vật $1s^22s^22p^2$	7 14,007 **N** 3,04 Nitơ Không khí $1s^22s^22p^3$	8 15,999 **O** 3,44 Oxi Không khí Nước $1s^22s^22p^4$	9 18,998 **F** 3,98 Flo Thuốc đánh răng $1s^22s^22p^5$	10 20,18 **Ne** Neon OPEN Biển báo $1s^22s^22p^6$
				13 26,98 **Al** 1,61 Nhôm Lá kim loại $[Ne]3s^23p^1$	14 28,09 **Si** 1,90 Silic Đá, cát $[Ne]3s^23p^2$	15 30,97 **P** 2,19 Photpho Xương $[Ne]3s^23p^3$	16 32,06 **S** 2,58 Lưu huỳnh Lòng đỏ trứng $[Ne]3s^23p^4$	17 35,45 **Cl** 3,16 Clo Thuốc tẩy trắng $[Ne]3s^23p^5$	18 39,95 **Ar** Agon Bóng đèn $[Ne]3s^23p^6$
27 58,93 **Co** 1,88 Coban Nam châm $[Ar]3d^74s^2$	28 58,71 **Ni** 1,91 Niken Tiền xu $[Ar]3d^84s^2$	29 63,54 **Cu** 1,90 Đồng Dây điện $[Ar]3d^{10}4s^1$	30 65,41 **Zn** 1,65 Kẽm Kèn đồng $[Ar]3d^{10}4s^2$	31 69,72 **Ga** 1,81 Gali 12:00 Đi-ốt phát sáng $[Ar]3d^{10}4s^24p^1$	32 72,64 **Ge** 2,01 Germani Điện tử $[Ar]3d^{10}4s^24p^2$	33 74,92 **As** 2,18 Asen Chất độc $[Ar]3d^{10}4s^24p^3$	34 78,96 **Se** 2,55 Selen Pin mặt t... $[Ar]3d^{10}4s^24p^4$	35 79,91 **Br** 2,96 Brom Thuốc giảm đau $[Ar]3d^{10}4s^24p^5$	36 83,80 **Kr** 3,0 Kripton ...la-de $[Ar]3d^{10}4s^24p^6$
45 102,91 **Rh** 2,28 Rođi Nồi nấu kim loại $[Kr]4d^85s^1$	46 106,40 **Pd** 2,20 Palađi Kiểm soát ô nhiễm $[Kr]4d^{10}5s^0$	47 107,87 **Ag** 1,93 Bạc Phim $[Kr]4d^{10}5s^1$	48 112,41 **Cd** 1,69 Cađimi Pin xạc $[Kr]4d^{10}5s^2$	49 114,82 **In** 1,78 Inđi Điện tử $[Kr]4d^{10}5s^25p^1$	50 118,69 **Sn** 1,96 Thiếc Vỏ hộp $[Kr]4d^{10}5s^25p^2$	51 121,75 **Sb** 2,05 Antimon [Stibi] Đúc chữ $[Kr]4d^{10}5s^25p^3$	52 127,60 **Te** 2,1 Telu Pin mặt trời $[Kr]4d^{10}5s^25p^4$	53 126,90 **I** 2,66 Iot Chất khử trùng $[Kr]4d^{10}5s^25p^5$	54 131,30 **Xe** 2,6 Xenon Hải đăng $[Kr]4d^{10}5s^25p^6$
77 192,20 **Ir** 2,20 Iriđi Trong thiên thạch gây tiệt chủng $[Xe]4f^{14}5d^76s^2$	78 195,09 **Pt** 2,28 Platin Đồ trang sức $[Xe]4f^{14}5d^96s^1$	79 196,97 **Au** 2,54 Vàng Đồ trang sức $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^1$	80 200,59 **Hg** 2,00 Thuỷ ngân Nhiệt kế $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^2$	81 204,37 **Tl** 1,62 Tali Chất độc $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$	82 207,20 **Pb** 2,33 Chì Tạ $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^2$	83 208,98 **Bi** 2,02 Bitmut Bình cứu hoả $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$	84 [209] **Po** 2,0 Poloni Nguồn hạt α $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^4$	85 [210] **At** 2,2 Atatin Đời sống ngắn $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^5$	86 [222] **Rn** Rađon Điều trị bức xạ $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^6$
109 [268] **Mt** Meitneri	110 [271] **Ds** Darmstadti								

Kim loại ← → Phi kim

Các nguyên tố s — Các nguyên tố p — Các nguyên tố d — Các nguyên tố f

62 150,35 **Sm** 1,17 Samari Đèn hồ quang $[Xe]4f^65d^06s^2$	63 151,96 **Eu** 1,2 Europi Chất phát quang màu $[Xe]4f^75d^06s^2$	64 157,25 **Gd** 1,2 Gadolini Kiểm soát phản ứng hạt nhân $[Xe]4f^75d^16s^2$	65 158,93 **Tb** 1,1 Terbi Tia la-de $[Xe]4f^95d^06s^2$	66 162,50 **Dy** 1,22 Điprozi Kiểm soát phản ứng hạt nhân $[Xe]4f^{10}5d^06s^2$	67 164,93 **Ho** 1,23 Honmi Chất phát quang màu $[Xe]4f^{11}5d^06s^2$	68 167,26 **Er** 1,24 Erbi Chất phát quang màu $[Xe]4f^{12}5d^06s^2$	69 168,93 **Tm** 1,25 Tuli Chất phát quang màu $[Xe]4f^{13}5d^06s^2$	70 173,04 **Yb** 1,1 Ytecbi Chất phát quang màu $[Xe]4f^{14}5d^06s^2$	71 174,97 **Lu** 1,27 Luteti Chất phát quang màu $[Xe]4f^{14}5d^16s^2$
94 [244] **Pu** 1,28 Plutoni Vũ khí hạt nhân	95 [243] **Am** 1,13 Americi Máy phát hiện khói	96 [247] **Cm** 1,28 Curi Năng lượng tàu vũ trụ	97 [247] **Bk** 1,3 Berkeli Ít công dụng	98 [251] **Cf** 1,3 Californi Máy đo	99 [252] **Es** 1,3 Einsteini Đời sống ngắn (vài tháng)	100 [257] **Fm** 1,3 Fermi Đời sống ngắn (vài ngày)	101 [258] **Md** 1,3 Mendelevi Đời sống ngắn (vài giờ)	102 [259] **No** 1,3 Nobeli Đời sống ngắn (vài phút)	103 [260] **Lr** Lowrenci Đời sống ngắn (vài giây)

NGUYỄN DUY ÁI

ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN

CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

394 - 2010/CXB/17- 568/GD Mã số : 8I922A0

MỤC LỤC

MỞ ĐẦU

Định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn là một trong những phần lí thuyết quan trọng nhất của hoá học, là cột sống của toàn bộ chương trình hoá học vô cơ.

Chẳng những nó là cơ sở để phân loại các nguyên tố hoá học mà còn là quy luật về mối quan hệ, về sự biến đổi tính chất của các nguyên tố cũng như các đơn chất và hợp chất tạo nên từ các nguyên tố đó.

1. Hệ thống tuần hoàn – sự thể hiện của định luật tuần hoàn – là bảng tổng kết sự phát triển cấu trúc nguyên tử của các nguyên tố từ đơn giản nhất đến phức tạp nhất

Thật vậy, hệ thống tuần hoàn đã "thâu tóm" toàn bộ khoảng 110 nguyên tố ngày nay đã biết[1], bắt đầu từ nguyên tố số 1 là hiđro (nguyên tử của nó đơn giản nhất, hạt nhân chỉ có 1 proton và vỏ chỉ có 1 electron) cho đến nguyên tử của nguyên tố số 110 (với hạt nhân gồm 110 proton và số nơtron lớn hơn 110, với lớp vỏ có 110 electron phân bố thành 7 lớp).

110 nguyên tố đó được xếp theo thứ tự các số tự nhiên tăng dần và cũng tự nhiên "đứng" vào hàng (chu kì), vào cột (nhóm), vào ô (số hiệu nguyên tử). Vì vậy, người ta còn gọi bảng tuần hoàn là bảng phân loại tự nhiên các nguyên tố hoá học tựa như sự phân loại cây cỏ, chim muông theo giống loài.

Người ta ước tính có khoảng 10^{80} nguyên tử gồm 110 dạng khác nhau, tức là 110 nguyên tố hoá học ngày nay đã biết. Chắc rằng trong tương lai sẽ tìm ra các nguyên tố mới nhưng "trữ lượng" của chúng có lẽ sẽ là vô cùng nhỏ và người ta đã dành sẵn chỗ cho chúng trong hệ thống tuần hoàn.

110 nguyên tố đó đã tạo lập nên hành tinh của chúng ta (với giới vô sinh và hữu sinh, trong đó có loài người) và không gian vũ trụ với những vì sao mà hiện nay con người đã "với tay" tới được.

Thực ra, mỗi nguyên tử của một nguyên tố là một thế giới riêng, có đời sống riêng, tuổi thọ và lịch sử riêng, nhưng vì sao tất cả các nguyên tố đó lại chịu sự chi phối bởi định luật tuần hoàn?

Bởi lẽ, tính tuần hoàn nằm ngay trong cấu trúc của bản thân nguyên tử của các nguyên tố : từ nguyên tố số 1 đến nguyên tố số 110, electron ngoài cùng cứ lần lượt tăng từ 1 đến 8, để rồi lại quay về 1... và cứ thế mà lặp đi lặp lại từ đầu đến cuối.

[1] Đã được "Liên đoàn hoá học lí thuyết và ứng dụng quốc tế" (IUPAC) thừa nhận.

2. Vị trí của một nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn là do cấu tạo nguyên tử của nguyên tố đó quy định

Từ cơ sở này có thể suy ra hai hệ quả sau đây :

a) Dựa vào cấu tạo nguyên tử (cấu hình electron) của một nguyên tố, có thể suy ra vị trí của nó trong hệ thống tuần hoàn.

b) Ngược lại, biết được vị trí của một nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn có thể suy ra cấu tạo nguyên tử (cấu hình electron) của nguyên tố đó.

Xác định được vị trí của một nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn (hay cấu tạo nguyên tử của nó) thì có lợi ích gì cho việc nghiên cứu hoá học?

Có lợi ở chỗ : từ cơ sở trên, *ta có thể suy ra được, dự đoán được những tính chất hoá học cơ bản của nguyên tố đó.* Ta có thể suy ra những tính chất hoá học cơ bản của nó mà *chưa cần nhìn thấy nó, chưa cần có nó trong tay.*

Theo cách này mà người ta dự đoán được những tính chất hoá học cơ ban của các nguyên tố ngày nay chưa biết, ... thậm chí người ta còn biết phải theo hướng nào để tìm ra nó, theo cách nào để "làm ra nó" trong phòng thí nghiệm.

Dĩ nhiên, những tính chất ta suy ra chỉ là những tính chất cơ bản. Sau này khi học phần các nguyên tố hoá học, ta sẽ nghiên cứu những tính chất lí hoá cụ thể của nó nhưng "tính nết chủ yếu của nó", "cách xử sự của nó" ta đã biết ngay từ khi học định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn.

3. Định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn là cơ sở khoa học hướng dẫn việc tìm ra các nguyên tố mới

Ý nghĩa quan trọng của một học thuyết là ở chỗ : dựa vào đó có thể kiểm tra được những sự kiện cũ và điều quan trọng hơn nữa là cho phép tiên đoán những sự kiện mới, những hiện tượng mới, hướng dẫn việc tạo ra những sự kiện, những hiện tượng ấy.

Nếu từ khi mới ra đời, *định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn đã là cơ sở hướng dẫn tìm ra cac nguyên tố chưa biết* thì ngày nay – hơn 100 năm sau – *định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn vẫn là cơ sở khoa học hướng dẫn việc tổng hợp các nguyên tố mới không tồn tại trong tự nhiên.*

Như ta đã biết, việc tổng hợp nhân tạo các nguyên tố mới thực chất là tăng số proton trong hạt nhân nguyên tử của nguyên tố đã biết lên một số đơn vị để ứng với số thứ tự trong hệ thống tuần hoàn của nguyên tố cần điều chế.

Để được công nhận là một nguyên tố mới, chẳng những phai xác định được điện tích hạt nhân nguyên tử, lại còn phải xác nhận về mặt hoá học những tính chất đặc trưng của nguyên tố đó.

Muốn vậy, phải dựa vào hệ thống tuần hoàn để dự đoán tính chất của nguyên tố mới.

Ta hãy lấy nguyên tố 104 là ví dụ.

Nguyên tố 104 rất không bền, chu kì bán huỷ nguyên tử chỉ có 0,3 giây, lại chỉ tổng hợp được có... 150 hạt nhân nguyên tử!

Theo giả thuyết actinit thì nguyên tố 104 phải tương tự nguyên tố hafni (Hf), nghĩa là nó thuộc các nguyên tố họ d, xếp ở nhóm IVB trong hệ thống tuần hoàn. Về mặt hoá học phải chứng minh được điều đó.

Dựa vào hệ thống tuần hoàn, người ta dự đoán :

Vì ở nhóm IV (không kể nhóm A hay B) nên số oxi hoá đặc trưng của nó là +4. Một trong những đặc điểm của Hf là muối halogenua của nó ($HfCl_4$) cũng dễ bay hơi. Vậy halogenua của nguyên tố 104 cũng phải như vậy.

Sau khi tổng hợp được nguyên tố 104, người ta clo hoá để tạo thành $(104)Cl_4$ dễ bay hơi, rồi dùng phương pháp sắc kí khí để tách ra.

Phải mất ba năm, các nhà khoa học ở viện Dubna (Liên Xô cũ) mới chứng minh được nguyên tố 104 là đồng đẳng của hafni.

Như vậy, trước đây, khi đã có nguyên tố trong tay người ta mới nghiên cứu được tính chất của nó.

Ngày nay, khi chưa tìm ra nguyên tố, nhưng dựa vào hệ thống tuần hoàn người ta đã dự đoán được những tính chất lí hoá học của nguyên tố đó và cả phương hướng "làm" ra nó[1].

4. Định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn còn là cơ sở để giải quyết vấn đề về lịch sử tạo thành các nguyên tố hoá học : sự phát sinh, phát triển và sự chuyển hoá giữa chúng

Các nguyên tố hoá học vốn có sẵn từ thuở "khai thiên lập địa" tồn tại vĩnh viễn, bất biến... hay chúng cũng có quá trình phát sinh, phát triển, chuyển hoá lẫn nhau?

Trong quá trình tiến hoá hàng triệu, hàng tỉ năm của vũ trụ, hệ thống tuần hoàn là "sợi chỉ đỏ" để lần ra những chặng đường tạo thành các nguyên tố hoá học.

Vật chất bề ngoài có vẻ như bất di bất dịch nhưng bên trong chứa đựng biết bao nhiêu điều kì diệu. Một giây qua đi, mỗi electron đã làm được một hành trình hàng ngàn cây số, đã xảy ra biết bao nhiêu lần sinh sinh hoá hoá... nguyên tố nọ phân rã biến thành nguyên tố kia, ông sinh ra cha, cha sinh ra con, con sinh ra cháu... tạo thành các họ phóng xạ khác nhau, mỗi họ có "ông tổ" của mình.

Trong "mớ bòng bong" đó, hệ thống tuần hoàn là "phả hệ" để nhận ra các đời con cháu của từng dòng họ.

5. Định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn với các ngành khoa học khác, sự phát triển của định luật tuần hoàn

Định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn đã có ảnh hưởng sâu rộng đến sự phát triển chẳng những của hoá học mà còn của nhiều ngành khoa học khác.

---

[1] Về nguyên tố 104 : Vào khoảng thời gian 1967–1970, phòng thí nghiệm Dubna (Liên Xô cũ) tổng hợp được nguyên tố 104 và đặt tên là Kusatovi (Ku). Đồng thời, phòng thí nghiệm Berkeley (Mỹ) cũng tổng hợp được 104 bằng phản ứng hạt nhân khác và đặt tên là Rudofodi (Rf).
Đến năm 1999, IUPAC thống nhất gọi nguyên tố 104 là Rudofodi (Rf).

– Không dựa vào hệ thống tuần hoàn thì khó mà xây dựng được mô hình cấu tạo lớp vỏ electron của nguyên tử. Niels Bohr (1885 – 1962) đã coi *hệ thống tuần hoàn là kim chỉ nam trong việc phát triển lí thuyết cấu tạo nguyên tử.*

– Ngành vật lí hạt nhân có bảng tuần hoàn các đồng vị của các hạt nhân nguyên tử.

– Các ngành tinh thể học hoá học, địa hoá học, các ngành kĩ thuật như kim loại học v.v... cũng tìm thấy ở định luật tuần hoàn sự hướng dẫn quý giá.

Mặt khác, do sự phát triển của các ngành khoa học mà *định luật tuần hoàn không ngừng phát triển*. Sau hơn 100 năm, việc nghiên cứu định luật tuần hoàn đã phát triển theo các hướng sau đây :

– Tìm ra nguyên nhân của sự biến đổi tuần hoàn tính chất của các nguyên tố.

– Giải thích sự phụ thuộc tuần hoàn tính chất của các đơn chất và hợp chất tạo ra từ các nguyên tố.

– Khám phá những tính chất mới biến đổi tuần hoàn.

– Không ngừng mở rộng giới hạn của hệ thống tuần hoàn do việc tìm ra cac nguyên tố mới.

– Hoàn chỉnh việc xây dựng hệ thống tuần hoàn và làm cho nó phù hợp với những thành tựu mới nhất trong lĩnh vực cấu tạo chất.

Tuy đã trải qua nhiều thử thách nhưng những thành tựu nghiên cứu của các ngành khoa học, kĩ thuật càng làm cho định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn có nội dung sâu sắc và mới mẻ hơn đúng như Mendeleep đã từng dự đoán : "...Chắc là trong tương lai, định luật tuần hoan không sợ bị đả phá mà chỉ càng được củng cố và phát triển".

6. Ý nghĩa sư phạm

Học hoá học là học tính chất của các chất và sự biến đổi của chúng. Có tất cả 110 nguyên tố, mà chỉ riêng nguyên tố cacbon đã có tới trên 3 triệu hợp chất (là nguyên tố có nhiều hợp chất nhất).

Ta không thể hình dung được sẽ học hoá học như thế nào nếu không có hệ thống tuần hoàn để tập hợp các nguyên tố thành họ, thành nhóm trên cơ sở những tính chất giống nhau; xếp chúng thành hàng để thấy được sự biến đổi tính chất từ đầu đến cuối hàng.

Hệ thống tuần hoàn có 8 nhóm, trong mỗi nhóm ta chọn nghiên cứu một vài nguyên tố điển hình đại diện cho nhóm nhưng ta không quên cá tính của mỗi thành viên cũng như tính "đóng đanh" của ông "trưởng họ".

Nắm vưng hệ thống tuần hoan cung như quy luật biến đổi tính chất theo hàng ngang, cột dọc, chính là cách "học 1, biết 10" trong hoá học.

Ta lại biết rằng khuynh hướng chung hiện nay trong công tác giảng dạy hoá học ở các cấp học là sớm trang bị cho học viên các lí thuyết chủ đạo, các quy luật chung. Vì vậy, việc nghiên cứu định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn càng được chú ý. Trong các sách giáo khoa hoá học, phần định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn đều chiếm một phần rất quan trọng.

Cuốn sách này gồm 7 phần

Phần một : Định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn Mendeleep

Phần hai : Định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn dưới ánh sáng của lí thuyết cấu tạo nguyên tử

Phần ba : Sự biến đổi tuần hoàn một số tính chất quan trọng của nguyên tử và đơn chất

Phần bốn : Sự biến đổi tuần hoàn một số tính chất quan trọng của hợp chất (hiđrua, oxit, hiđroxit)

Phần năm : Các kiểu bảng tuần hoàn. Giới hạn của hệ thống tuần hoàn

Phần sáu : Nguồn gốc các nguyên tố hoá học. Cách đặt tên các nguyên tố hoá học

Phần bảy : Xuất xứ và lịch sử tìm ra các nguyên tố hoá học

Phần tám : Một số bài tập tổng hợp (rút ra từ các bài thi Olympic Hoá học quốc tế và một số quốc gia) và hướng dẫn trả lời câu hỏi và bài tập

Để giúp bạn đọc củng cố và kiểm tra kiến thức, cuối mỗi phần đều có một số câu hỏi và bài tập. Lời giải của một số bài tập tiêu biểu được xếp ở cuối sách (phần tám).

Cuốn sách này được biên soạn chủ yếu nhằm giúp các bạn giáo viên hoá học các trường trung học cơ sở, trung học phổ thông tìm hiểu sâu hơn một trong những phần lí thuyết quan trọng nhất của giáo trình hoá học, là cột sống của chương trình hoá học trường phổ thông; góp phần nâng cao chất lượng giảng dạy môn học theo chương trình sách giáo khoa mới.

Cuốn sách cũng có ích đối với sinh viên khoa Hoá học các trường Cao đẳng Sư phạm, Đại học Sư phạm và những ai quan tâm đến sự phát triển của hoá học.

Tác giả chân thành cảm ơn những ý kiến nhận xét của bạn đọc.

Tác giả

PHẦN MỘT

ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN MENDELEEP

... Hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học là một trong những phát kiến xuất sắc nhất trong hoá học. Song đôi khi người ta đã lãng quên những khó khăn mà các nhà bác học đã vấp phải trong những ngày đầu xây dựng hệ thống tuần hoàn.

Day và Selbin (Mỹ) – 1976

1. SƠ LƯỢC LỊCH SỬ XÂY DỰNG ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN (ĐLTH) VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN (HTTH) CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC

Cho đến năm 1800 người ta mới biết có 36 nguyên tố hoá học kể cả những nguyên tố như vàng, đồng, sắt... đã biết từ thời cổ.

Nhờ có các phương pháp mới do Berzelius (1779 – 1848), Guy Lussac (1787 – 1850), Bunsen (1811 – 1899)... sáng tạo ra, đặc biệt là phương pháp phân tích quang phổ và phương pháp xác định trọng lượng nguyên tử, tốc độ tìm ra các nguyên tố mới đã tăng nhanh. Cho đến năm 1869, số nguyên tố đã biết tăng lên gấp rưỡi (63 nguyên tố).

Lúc bấy giờ trong hoá học người ta đã tích luỹ được một khối lượng lớn các dữ kiện thực nghiệm, trong đó lẫn lộn cả đúng, cả sai. Người ta còn chưa phân biệt được trọng lượng nguyên tử và đương lượng(1), mà trọng lượng nguyên tử của nhiều nguyên tố cũng chưa đáng tin cậy.

Muốn cho hoá học phát triển cần phải :

– Tìm cách phân loại các nguyên tố hoá học, hệ thống hoá các dữ kiện thực nghiệm.

– Tìm ra một quy luật chung chi phối tính chất của các nguyên tố hoá học cũng như hợp chất của chúng.

Nhiều nhà bác học đã tìm ra cách phân loại các nguyên tố hoá học hoặc đi tìm quy luật biến đổi tính chất của chúng, trong đó có các công trình đáng chú ý sau đây :

(1) Đương lượng của một nguyên tố là số phần khối lượng của nguyên tố đó kết hợp với 1,008 phần khối lượng của hidro hoặc 8 phần của oxi hoặc thay thế những lượng đó trong hợp chất.

1.1. Các cách phân hạng trước Mendeleep

1.1.1. Cách phân hạng của J.W.Dobereiner

Nhà bác học Đức J.W.Dobereiner (1780 – 1849) là người đầu tiên phát hiện ra một vài dấu hiệu của trật tự sắp xếp các nguyên tố. Năm 1817, ông thấy trong bộ ba Cl, Br, I, không chỉ có sự thay đổi dần trạng thái tập hợp (khí, lỏng, rắn), màu sắc (lục, nâu, tím), khả năng phản ứng, mà còn có sự thay đổi dần trọng lượng nguyên tử. Trọng lượng nguyên tử của nguyên tố ở giữa bằng trung bình cộng trọng lượng nguyên tử của hai nguyên tố kia.

Theo hướng đó, ông xếp các nguyên tố đã biết lúc đó thành 5 bộ ba. Ông gọi mỗi bộ ba như vậy là một nhóm tam tố.

Về sau, người ta bắt đầu gọi các tập hợp nguyên tố này là các *nhóm tự nhiên*.

Bảng 1.1. Các bộ ba của J.W.Dobereiner

Li	Ca	P	S	Cl
Na	Sr	As	Se	Br
K	Ba	Sb	Te	I

Trọng lượng nguyên tử		Số hiệu nguyên tử	
Li 7, Na 23, K 39	$\frac{7+39}{2} = 23$	Li 3, Na 11, K 19	$\frac{3+19}{2} = 11$
Ca 40, Sr 87, Ba 137	$\frac{40+137}{2} = 88.5$	Ca 20, Sr 38, Ba 56	$\frac{20+56}{2} = 38$
P 31, As 75, Sb 122	$\frac{31+122}{2} = 76.5$	P 15, As 33, Sb 51	$\frac{15+51}{2} = 33$
S 32, Se 78, Te 128	$\frac{31+128}{2} = 80$	S 16, Se 34, Te 52	$\frac{16+52}{2} = 34$
Cl 35,5, Br 80, I 127	$\frac{35,5+127}{2} = 81,25$	Cl 17, Br 35, I 53	$\frac{17+53}{2} = 35$

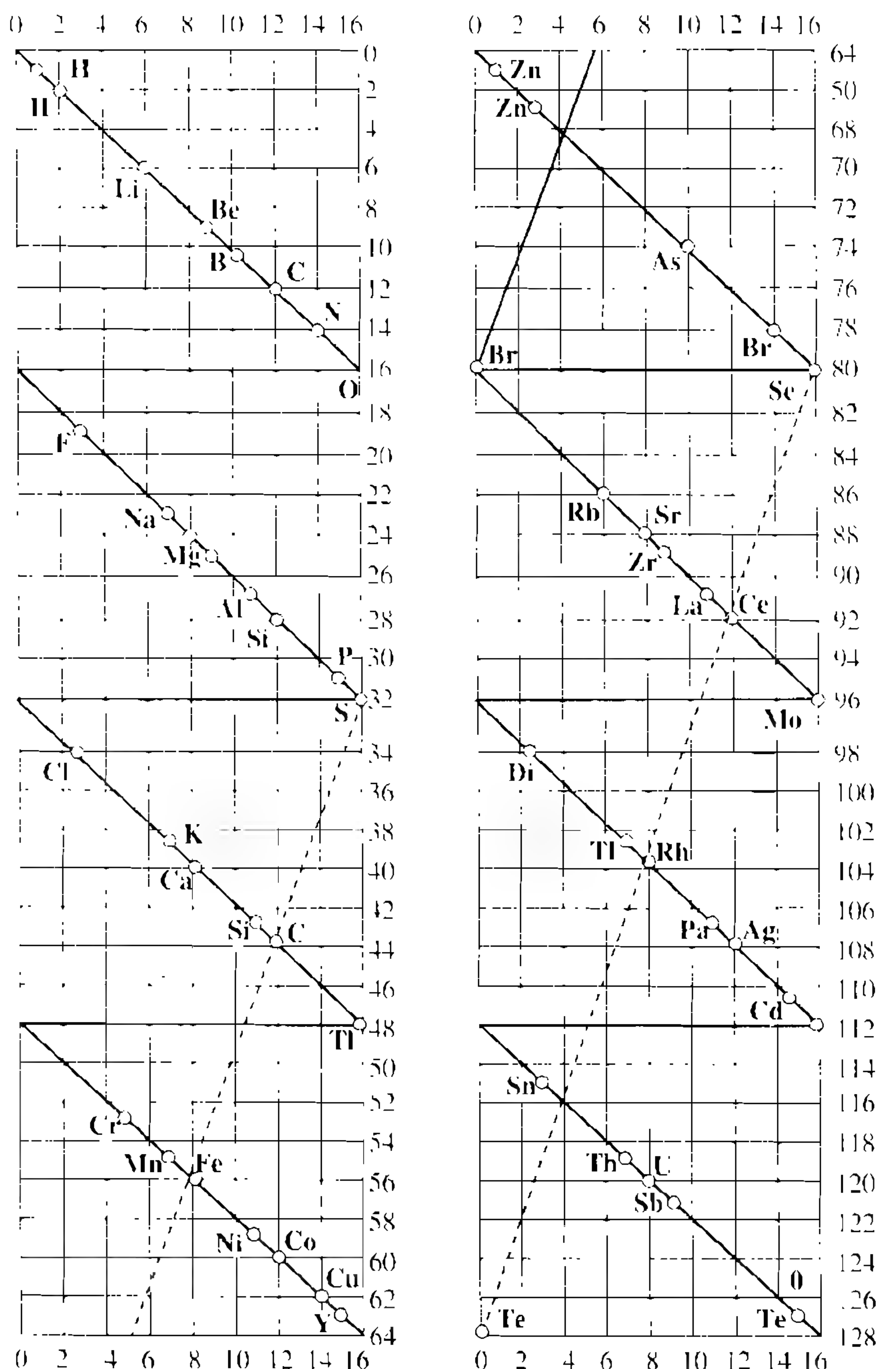
H							He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Al	Si	**P**	**S**	**Cl**	Ar
K	**Ca**	Ga	Ge	**As**	**Se**	**Br**	Kr
Rb	**Sr**	In	Sn	**Sb**	**Te**	**I**	Xe
Cs	**Ba**	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

1.1.2. Cách phân hạng của Chancourtois

Năm 1862, nhà bác học Pháp Chancourtois (1820 – 1886) đã xếp 50 nguyên tố theo trật tự trọng lượng nguyên tử tăng dần trên một đường xoắn ốc lượn quanh một hình trụ. Trong đại đa số trường hợp, các nguyên tố giống nhau được sắp xếp nguyên tố nọ dưới nguyên tố kia theo các đường sinh của hình trụ.

Cách phân hạng này có nhiều mâu thuẫn nên ít được mọi người chú ý.
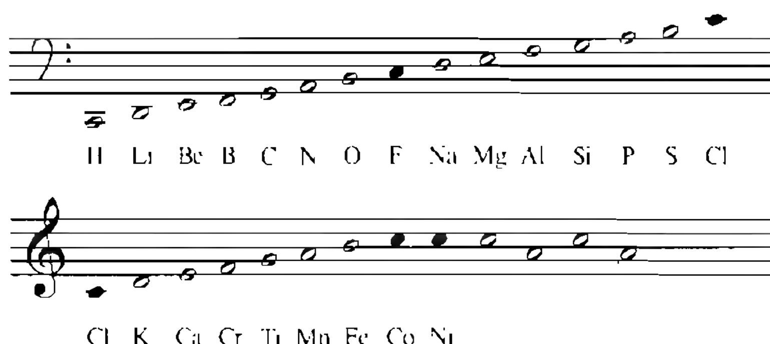
Bảng 1.2. Bảng các nguyên tố hoá học của Chancourtois



1.1.3. Cách phân hạng của John Newland

Năm 1864, nhà hoá học Anh John Newland (1837 – 1898) đề xướng ra *định luật bát độ*. Ông cho rằng mọi hiện tượng trên thế giới đều tuân theo sự hài hoà chung. Sự hài hoà này là thống nhất trong hoá học cũng như trong âm nhạc. Do đó, tính chất các nguyên tố hoá học xếp theo chiều tăng dần của trọng lượng nguyên tử phải lặp lại sau tập hợp 7 nguyên tố cũng như các nốt nhạc trên âm giai nối tiếp nhau trong bát độ (octave) sau mỗi tập hợp 7 nốt nhạc (đô, rê, mi, pha, son, la, si).

Định luật bát độ của John Newland



Tuy nhiên, theo định luật bát độ, nhiều nguyên tố hoàn toàn khác nhau như cacbon và thuỷ ngân hoá ra thành giống nhau.

Newland có thấy được sự lặp lại (sự tuần hoàn) tính chất các nguyên tố theo "từng tám nguyên tố một", nhưng đó chỉ là một mắt xích của định luật tuần hoàn. Thực ra định luật tuần hoàn phức tạp hơn nhiều, các chu kì lặp lại là 2, 8, 18, 32 nguyên tố chứ không phải chỉ có 8.

Bảng 1.3. Các bát độ của John Newland

No.	No.	No.	No.	No.	No.	No.	No.
H 1	F 8	Cl 15	Co,Ni 22	Br 29	Pd 36	I 42	Pt,Ir 50
Li 2	Na 9	K 16	Cu 23	Rb 30	Ag 37	Cs 44	Tl 53
Be 3	Mg 10	Ca 17	Zn 25	Sr 31	Cd 38	Ba,V 45	Pb 54
B 4	Al 11	Cr 19	Y 24	Ce/La 33	U 40	Ta 46	Th 56
C 5	Si 12	Ti 18	In 26	Zr 32	Sn 39	W 47	Hg 52
N 6	P 13	Mn 20	As 27	Di/Mo 34	Sb 41	Nb 48	Bi 55
O 7	S 14	Fe 21	Se 28	Ro,Ru 35	Te 43	Au 49	Os 51

1.1.4. Cach phân hạng của Lothar Meyer và Odling

Tiến gần đến chân lí hơn cả là nhà bác học Anh Odling (1829–1921) và nhà bác học Đức Lothar Meyer (1830–1895).

Năm 1864, Lothar Meyer xếp các nguyên tố theo hoá trị. Ông đã đề nghị một bảng gồm 28 nguyên tố (trong tổng số 62 nguyên tố đã biết) thành 6 nhóm nguyên tố điển hình và có liên quan với nhau theo hình dưới đây :



Hình 1.1. Lothar Meyer (1830–1895)

Bảng 1.4. Bảng phân hạng của Lothar Meyer

Li	Be						(Al)	Al				C	N	O	F
Na	Mg											Si	P	S	Cl
K	Ca	Ti	Mo	-	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	-	As	Se	Br
Rb	Sr	Zr	V	-	-	Ru	Rh	Pd		Ag	Cd	Sn	Sb	Te	I
Cs	Ba	Ta	W			Pt	Ir	Os		Au	Hg	Pb	Bi		
Tl															

Bảng phân hạng của Lothar Meyer, 1870

I.	II.	III.	IV.	V.	VI.	VII.	VIII.	IX.
	B = 11,0	Al = 273		--		?In = 113,4	Tl = 202,7	
	C = 11,97	Si = 28		--		Sn = 117,8		Pb = 206
			Ti = 48		Zr = 49,7		--	
	N = 14,01	P = 30,9		As = 74,9		Sb = 112,1		Bi = 207,5
			V = 51,2		Nb = 93,7		Ta = 182,2	
	O = 15,96	31,98		Se = 78		Te = 128?		--
			Cr = 52,4		Mo = 95,6		W = 183,5	
--	F = 19,1	Cl = 35,38		Br = 79,75		J = 126,5		--
			Mn = 54,8		Ru = 103,5		Os = 198,6	
			Fe = 55,9		Rh = 104,1		Ir = 196,7	
			Co = Ni = 58,6		Pd = 106,2			
Li = 7,01	Na = 22,99	K = 39,04		Rb = 85,2		Cs = 132,7		--
			Cu = 63,3		Ag = 107,66		Au = 196,2	
?Be = 93	Mg = 23,9	Ca = 39,9		Sr = 87,0		Ba = 136,8		
			Zn = 64,9		Cd = 111,6		Hg = 199,8	

Bang phan hang cua Lothar Meyer gần giống bảng Mendeleep sau này.

Năm 1868, Odling đề xuất ra một bảng sắp xếp mới.

Bảng 1.5. Bảng phân hạng của Odling

I	F 19	–	Cl 35,5	Br 80	I 127	–	–
II	O 16	–	S 32	Se 79,2	Te 128	–	–
III	N 14	–	P 31	As 75	Sb 120	–	Bi 213
IV	B 14,5	Si 28,5	Ti 48,4	–	Sn 117,8	–	–
V	Li 6,5	Na 23	K 39	–	–	–	–
VI	Ca 20	Sr 43,8	Ba 68,5	–	–	–	-
VII	Mg 12,2	Zn 32,5	Cd 55,5	–	–	–	–
VIII	*G** 4,7	*Y* 32	*Th* 59,6	–		–	–
IX	*Al* 13,7	– *Mn* 27,6	Zr 33,6 *Co* 29,5	Ce 46 –	*U* 60 –	–	–
X	*Cr* 26,3	– Fe 28	– Ni 29,5	*Cu* 31,6 –	–	–	–
XI	Mo 46	*V* 68,5	W 92	–			–
XII	*Hg* 100	*Pb* 106,6	*Ag* 108	–	–	–	–
XIII	Pd 53,2	Pt 98,6	–	*Au* 196,6	–	–	

Cách phân hạng của Lothar Meyer và Oddling cũng như các cách phân hạng trước đó đều thiếu điều cơ bản là *chưa phản ánh được tính quy luật cơ bản chung trong sự biến đổi tính chất các nguyên tố.*

Hệ thống tuần hoàn không chỉ là sự sắp xếp giản đơn các nguyên tố theo tính chất hoá học (và một số tính chất vật lí) mà nó phải là sự thể hiện một trong những tính quy luật tổng quát của tự nhiên, chi phối tính chất cac nguyên tố.

1.2. Cách phân hạng của Mendeleep (1834 – 1907)

Trong quá trình nghiên cứu, sắp xếp các nguyên tố, nhà hoa học Nga D.I.Mendeleep đã phân tích một cách sâu sắc mối liên hệ giữa trọng lượng nguyên tử của các nguyen tố với những tính chất lí, hoá học của chúng, đặc biệt là hoá trị.

Ông nhận thấy có *sự biến đổi tuần hoàn những tính chất đó theo chiều tăng của trọng lượng nguyên tử.*

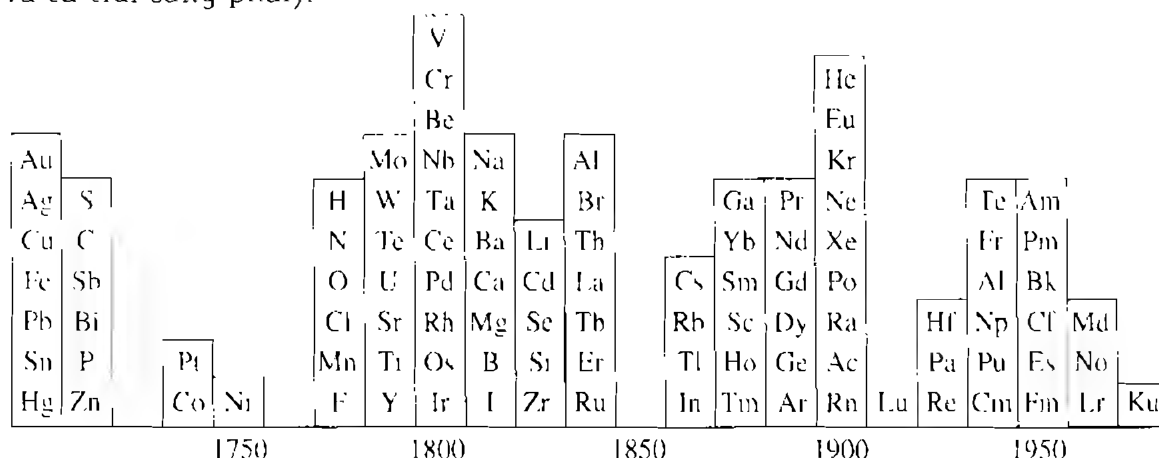
Tuy nhiên, nếu sắp xếp các nguyên tố đã biết năm 1869 (63 nguyên tố, nghia la mới bằng một nửa số nguyên tố đã biết ngày nay) theo chiều tang dần cua trọng lượng nguyên tử đã được khoa học xác định lúc bấy giờ thì không thể tìm ra định luật tuần hoàn bởi lẽ trọng lượng nguyên tử của nhiều nguyên tố xác định sai, do đó nhiều nguyên tố có tính chất giống nhau không thể tập hợp vào cùng một nhóm và không thể xác định được chu kì.

Ở đây, Mendeleep đã dựa vào những hiểu biết sâu sắc về tính chất hoá học của các nguyên tố đã được tích luỹ trong suốt nhiều thế kỉ, với trực giác khoa học nhạy bén và lòng dũng cảm khoa học, ông đã :

– Hiệu chỉnh lại nguyên tử lượng (khối lượng nguyên tử) của nhiều nguyên tố như : Be, In, Ce, Y, Th, U, v.v...

– Bỏ trống vị trí một số ô mà ông cho rằng đó là vị trí của những nguyên tố chưa được tìm ra (Ông bỏ trống 12 ô sau này là vị trí của Sc, Ga, Ge, Hf...).

Tháng 12/1869, ông công bố "hệ thống các nguyên tố", trong đó các nguyên tố được sắp xếp theo chiều tăng của trọng lượng nguyên tử (từ trên xuống dưới và từ trái sang phải).



Hình 1.2. Biểu đồ trình bày sơ lược thứ tự thời gian tìm ra các nguyên tố hoá học
Trục năm ngang ghi các năm, cách nhau nửa thế kỉ.
Chiều cao các cột ghi các nguyên tố được tìm ra trong vòng hơn một thập kỉ.

Bảng 1.6. Hệ thống các nguyên tố của Mendeleep (Bảng công bố năm 1869)

			Ti = 50	Zr = 90	? = 180
			V = 51	Nb = 94	Ta = 182
			Cr = 52	Mo = 96	W = 186
			Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,4
			Fe = 56	Ru = 104,4	Ir = 198
			Ni = Co = 59	Pt = 106,6	Os = 199
H = 1			Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200
	Be = 9,4	Mg = 24	Zn = 65,2	Cd = 112	
	B = 11	Al = 27,4	? = 68	Ur = 116	Au = 197?
	C = 12	Si = 28	? = 70	Sn = 118	
	N = 14	P = 31	As = 75	Sb = 112	Bi = 210?
	O = 16	S = 32	Se = 79,4	Te = 128?	
	F = 19	Cl = 35,5	Br = 80	I = 127	
Li = 7	Na = 23	K = 39	Rb = 85,4	Cs = 133	Tl = 204
		Ca = 40	Sr = 87,6	Ba = 137	Pb = 207
		? = 45	Ce = 92		
		?Er = 56	La = 94		
		?Yt = 60	Di = 65		
		?In = 75,6	Th = 118?		

Bảng 1.7. Sự sắp xếp các nguyên tố theo chu kì (cột dọc) và nhóm (hàng ngang)

(Theo giáo trình "Những cơ sở hoá học của Mendeleep" tái bản lần thứ 4 năm 1881)

R_2O	I		Li = 7	K 39	Rb 85	Cs 133	– –	– –
RO	II		Be = 9	Ca 40	Sr 87	Ba 137	– –	– –
R_2O_3	III		B = 11	Sc 44	Y 89	La 138	Yb 173	– –
RO_2	IV	(H_4C)	C = 12	Ti 48	Zr 90	Ce 142	– –	Th 231
R_2O_6	V	(H_3N)	N = 14	V 51	Nb 94	Di 146	Ta 182	– –
RO_3	VI	(H_2O)	O = 16	Cr 52	Mo 96	– –	W 184	U 240
R_2O_7	VII	(HF)	F = 19	Mn 55	– –	– –	– –	–
RO_4				Fe 56	Ru 103	– –	Os 192?	– –
	VIII			Co 58	Rh 104	– –	Ir 193	– –
				Ni 59	Pd 106	– –	Pt 195	– –
R_2O	I	H = 1	Na 23	Cu 63	Ag 108	– –	Au 196	–
RO	II		Mg 24	Zn 65	Cd 112	– –	Hg 200	–
R_2O_3	III		Al 27	Ga 69	In 113	– –	Tl 204	–
RO_2	IV	(H_4R)	Si 28	?P 72	Sn 118	– –	Pb 206	– –
R_2O_5	V	(H_3R)	P 31	As 75	Sb 120	– –	Bi 209	–
RO_3	VI	(H_2R)	S 32	Se 79	Te 125	– –	– –	– –
R_2O_7	VII	(HR)	Cl 35,5	Br 80	I 127	– –	– –	– –

Hai năm sau, năm 1871, ông quay bảng đầu tiên (bảng năm 1869) một góc 90^0 và gọi tên là "Hệ thống tự nhiên các nguyên tố hoá học". Bảng này có dạng như ngày nay.

Bảng 1.8. Hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học của Mendeleep (đề xuất năm 1871)

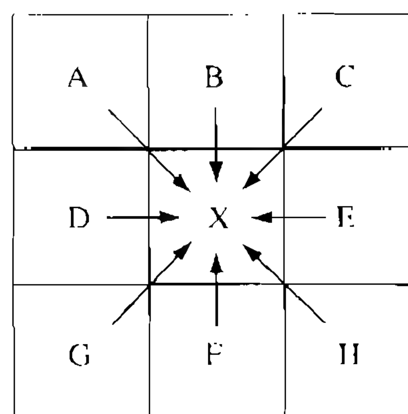
Chu kì	Nhóm I	Nhóm II	Nhóm III	Nhóm IV	Nhóm V	Nhóm VI	Nhóm VII	Nhóm VIII
	–	-	–	RH_4	RH_3	RH_2	RH	–
	R_2O	RO	R_2O_3	RO_2	R_2O_5	RO_3	R_2O_7	RO_4
1	H = 1							
2	Li = 7	Be = 9,4	B = 11	C = 12	N = 14	O = 16	F = 19	
3	Na = 23	Mg = 24	Al = 27,3	Si = 28	P = 31	S = 32	Cl = 35,5	
4	K = 39	Ca = 40	– = 44	Ti = 48	V = 51	Cr = 52	Mn = 55	Fe = 56, Co = 59, Ni = 59, Cu = 63.
5	(Cu = 63)	Zn = 65	– = 68	– = 72	As = 75	Ge = 78	Br = 80	
6	Br = 85	Sr = 87	?Yt = 88	Zr = 90	Nb = 94	Mo = 96	– = 100	Ru = 104, Rh = 104, Pd = 106, Ag = 108.
7	(Ag = 109)	Cd = 112	In = 113	Sn = 118	Sb = 122	Te = 125	I = 127	
8	Cs = 133	Ba = 137	?Di = 138	?Ce = 140	–	–	–	— — — —
9	–	–	–	–	–	–		
10	–	–	?Er = 178	?La = 180	Ta = 182	W = 184	–	Os = 195, Ir = 197, Pt = 198, Au = 199.
11	(Au = 199)	Hg = 200	Tl = 204	Pb = 207	Bi = 208	–	–	
12	–	–	–	Th = 231	–	C = 240	–	— — — —

Bảng tuần hoàn của Mendeleep ra đời bị đón tiếp lạnh nhạt, thậm chí còn bị một số các nhà bác học công kích bởi lẽ ông đã :

" ... Dựa vào một định luật do chính mình khám phá ra, chưa được mọi người công nhận mà đã dám sửa lại trọng lượng nguyên tử của nhiều nguyên tố mà các nhà bác học có uy tín đã từng xác định."

Năm 1871, Mendeleep phát biểu định luật tuần hoàn một cách đầy đủ trên tạp chí của Hội Hoá học Nga.

Ông cho rằng : nếu định luật tuần hoàn là đúng thì tính chất của một nguyên tố X bất kì trong bảng tuần hoàn phải liên hệ có quy luật với các nguyên tố lân cận theo hàng ngang, cột dọc và theo hướng chéo.



Hình 1.3. Sự liên quan về tính chất giữa các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn

Tính chất của một nguyên tố X bất kì nào cũng liên hệ một cách có quy luật theo chiều ngang (D, E), chiều dọc (B, F), theo đường chéo (A, H và C, G).

Dựa vào đó ông tiên đoán tính chất của 12 nguyên tố chưa biết (sau này là vị trí của Sc, Ga, Ge...), đặc biệt ông mô tả tính chất của 3 nguyên tố (chưa được tìm ra) tỉ mỉ đến mức nhiều nhà nghiên cứu khác dù đã có trong tay nguyên tố đó cũng khó mà làm được.

Mendeleep viết : "Tôi quyết định làm điều đó là để sau này khi tìm ra một trong các nguyên tố mà tôi tiên đoán sẽ có thể thuyết phục các nhà bác học khác về tính đúng đắn của định luật tuần hoàn".



Hình 1.4. Lecoq de Boisbaudran (1838-1912)

Lúc bấy giờ có nhiều bài báo chế diễu, mỉa mai những tiên đoán của ông là "viển vông", "không tưởng", "thiếu khiêm tốn"...

Nhưng bốn năm sau, năm 1875, nhà bác học Pháp là Lecoq de Boisbaudran tìm ra nguyên tố mới và đặt tên là gali (Ga) để tôn vinh tổ quốc mình có tên là Gaule trong thời cổ. Tính chất của nguyên tố mới này trùng lặp với những điều mà Mendeleep đã tiên đoán và chính Mendeleep đã đề nghị sửa lại tỉ khối của Ga là 5,9 chứ không phải là 4,7 như Lecoq de Boisbaudran đã xác định nhầm.

Bảng 1.9. Tính chất của gali

Do Mendeleep tiên đoán	Lecoq de Boisbaudran tìm ra (năm 1875)
Eka nhôm Ea	Gali Ga
– Khối lượng nguyên tử : ~68.	– Khối lượng nguyên tử : 69,72.
– Đơn chất có nhiệt độ nóng chảy thấp.	– Điểm nóng chảy của đơn chất gali là 30°C.
– Tỉ khối gần 5,9.	– Tỉ khối (rắn) : 5,904.
– Thể tích nguyên tử :11,5.	– Thể tích nguyên tử : 11,7.
– Không bị oxi hoá trong không khí.	– Chỉ bị oxi hoá nhẹ khi đun nóng đỏ.
– Phân huỷ nước khi đun nóng đỏ.	– Phân huỷ nước ở nhiệt độ cao.
– Công thức của hợp chất : $EaCl_3$, Ea_2O_3, $Ea_2(SO_4)_3$.	– Công thức các hợp chất : $GaCl_3$, Ga_2O_3, $Ga_2(SO_4)_3$.
– Tạo thành phèn nhưng khó hơn nhôm: $Ea_2(SO_4)_3$, $Ea_2SO_4.24\ H_2O$.	– Tạo thành phèn : $NH_4Ga(SO_4)_2.12H_2O$.
– Oxit Ea_2O_3 dễ bị khử thành kim loại dễ bay hơi hơn nhôm và vì vậy có thể hi vọng rằng Eka nhôm sẽ được tìm ra bằng phương pháp phân tích quang phổ.	– Ga được tạo thành từ việc khử oxit nung nóng đỏ trong luồng hiđro. Được tìm ra bằng phương pháp phân tích quang phổ.
– $EaCl_3$ dễ bay hơi.	– $GaCl_3$ điểm sôi là 215 – 220°C.

Bốn năm sau đó, năm 1879, nhà bác học Fréderic Nilson (1840–1899) người Thuỵ Điển tìm ra nguyên tố scanđi. Nilson viết : "Không nghi ngờ gì nữa, nguyên tố scanđi chính là nguyên tố ekabo mà nhà bác học Nga đã dự đoán". Ông đặt tên là scandi để tỏ lòng biết ơn quê hương ông : bán đảo Scanđinave.



Hình 1.5. Fréderic Nilson (1840 – 1899)

Bảng 1.10. Tính chất của scanđi

Theo tiên đoán của Mendeleep (1871)	Nilson tìm ra năm 1879
Ekabo : Eb	Scanđi : Sc
– Trọng lượng nguyên tử : 44	– Trọng lượng nguyên tử : 45,1
– Oxit ekabo : Eb_2O_3	– Oxit scanđi : Sc_2O_3
– Tỉ khối của oxit :3,5	– Tỉ khối của oxit : 3,864
– Hiđrat $Eb(OH)_3$ không tan trong kiềm	– Hiđrat $Sc(OH)_3$ không tan trong kiềm.
– Muối sunfat $Eb_2(SO_4)_3$ ít tan	– Muối $Sc_2(SO_4)_3.6H_2O$ ít tan
– Muối sunfat kép $K_3[Eb(SO_4)_3]$ không đồng hình với phèn bát diện.	– Muối sunfat kép $3K_2SO_4.Sc_2(SO_4)_3$ kết tinh theo khối lăng trụ.

Mười bảy năm sau lời tiên đoán của Mendeleep, năm 1886, nhà bác học Đức Clémens Winkler (1838 – 1904) đã tìm ra nguyên tố germani (Ge). Nguyên tố mới đó được đặt tên theo tên dân tộc của tác giả tìm ra nó (Germany).

Winkler viết : "...Nguyên tố mới germani không có gì khác mà chính là nguyên tố eka silic do Mendeleep đã tiên đoán.

Không nghi ngờ gì nữa, định luật tuần hoàn đã mở ra cho khoa học một chân trời mới, là một bước tiến khổng lồ trên con đường nhận thức".



Hình 1.6. Clémens Winkler (1838 –1904)

Bảng 1.11. Tính chất của germani

Tiên đoán của Mendeleep (1871)	Winkle tìm ra năm 1886
Eka silic : Es.	Germani : Ge.
– Trọng lượng nguyên tử : 72.	– Trọng lượng nguyên tử : 72,60.
– Tỉ khối : 5,5.	– Tỉ khối : 5,35.
– Thể tích nguyên tử : 13.	– Thể tích nguyên tử : 13,4.
– Oxit bậc cao : EsO_2.	– Oxit bậc cao : GeO_2.
– Tỉ khối : 4,7.	– Tỉ khối : 4,703.
– Hợp chất với clo : $EsCl_4$, lỏng.	– Hợp chất với clo : $GeCl_4$, lỏng.
– Nhiệt độ sôi : gần 90°C.	– Nhiệt độ sôi : 86,5°C.
– Tỉ khối : 1,9.	– Tỉ khối : 1,887.
– Hợp chất cơ kim $Es(C_2H_5)_4$.	– Hợp chất cơ kim $Ge(C_2H_5)_4$.
– Nhiệt độ sôi : 160°C.	– Nhiệt độ sôi : 163,5°C.
– Tỉ khối : 0,96.	– Tỉ khối : 0,991.

Những tiên đoán của Mendeleep đã được xác minh một cách xuất sắc. Định luật tuần hoàn đã được mọi người thừa nhận, nhiều nước mạnh dạn đưa định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn vào sách giáo khoa hoá học.

1.3. Những thử thách lớn đối với định luật tuần hoàn

1.3.1. Việc tìm ra các khí trơ

Ngày 26 tháng 10 năm 1868, trong phiên họp của Viện Hàn lâm khoa học Paris, người ta lần lượt đọc hai bức thư : một bức của nhà thiên văn học người Pháp là Jansen gửi từ Ấn Độ tới, bức kia của nhà thiên văn học người Anh là N.Lokier từ Anh sang. Một cách độc lập với nhau, họ thông báo rằng trong phổ các phần lõi của Mặt Trời có một vạch vàng không thuộc về bất kì nguyên tố nào đã biết trên Trái Đất. Người ta kết luận rằng vạch mới trong phổ thuộc về một nguyên tố đặc biệt trên vũ trụ. Người ta gọi nó là *heli*, tên của Mặt Trời thời Cổ đại.

Một phần tư thế kỉ sau, khi quan sát các chất khoáng chứa urani và thori bị nung nóng, nhà địa chất và hoá học V.Hildebrand nhận thấy có một chất khí không cháy thoát ra.

Nhà hoá học và vật lí học người Anh W.Crooks, một trong những nhà quang phổ học giàu kinh nghiệm đã nghiên cứu quang phổ của khí đó và chứng tỏ được rằng nó chính là *heli*.

Vậy là, chất khí trước đây lần đầu tiên thấy ở Mặt Trời nay cũng phát hiện thấy ở Trái Đất. *Heli* là chất khí nhẹ nhất sau hiđro.

Hai mươi lăm năm sau khi phát hiện ra heli trên Mặt Trời, nhà vật lí học người Anh là D.Raleigh nhận thấy một hiện tượng kì lạ : tỉ khối của nitơ tinh khiết tách từ không khí lớn hơn tỉ khối của nitơ điều chế từ các hợp chất nitơ. Sự sai khác không đáng kể, vài phần nghìn gam trên một lít, nhưng dù sao vẫn có sự sai khác.

Ông cùng bạn mình là nhà hoá học nổi tiếng người Anh Ramsay quyết định mỗi người sẽ không rời khỏi phòng thí nghiệm của mình chừng nào điều bí ẩn chưa được phanh phui.

Họ sử dụng những phương pháp khác nhau và cùng tìm thấy rằng trong không khí thông thường có chứa một tạp chất nào đó và có không ít : mỗi lít không khí chứa khoảng 10 cm^3 một chất khí không biết, họ đặt tên nó là *agon*.

Chất khí này thật kì lạ. Các nhà hoá học chưa từng thấy một chất nào tương tự. Không có cách nào buộc chất khí đó tham gia phản ứng hoá học. Do vậy, những người tìm ra nó đặt tên nó là *agon*. Agon theo tiếng Hy Lạp là "lười".

Năm năm sau khi tìm ra agon, người ta tìm ra một khí mới và đặt tên là neon (tiếng Hi Lạp nghĩa là mới).

Chỉ sau đó một thời gian ngắn, Ramsay và cộng tác viên của ông là Travers phát hiện thêm trong khí quyển hai nguyên tố nữa là *kripton* (có nghĩa là bí ẩn) và *xenon* (có nghĩa là ẩn dấu).

Năm nguyên tố mới được tìm ra trong một thời gian ngắn. Cả năm nguyên tố mới hình như không có tính chất hoá học, cho nên từ hồi ấy các nguyên tố đó được gọi chung là *các khí trơ*! Không có vị trí nào thích hợp dành cho chúng trong hệ thống tuần hoàn.

Như vậy, trên Trái Đất có những nguyên tố không có chỗ trong hệ thống tuần hoàn! Nhưng giá trị của sự phân loại của Mendeleep là ở chỗ nào nếu có những 5 nguyên tố nằm ngoài phạm vi của hệ thống!

Vậy định luật tuần hoàn không chính xác, không đầy đủ, không phải là một định luật tổng quát của tự nhiên!

Tháng 2 năm 1900, Mendeleep và Ramsay gặp nhau tại Berlin và đề nghị cách giải quyết cực kì đơn giản như ngày nay ta đã biết: nhóm khí trơ là một nhóm độc lập nằm giữa nhóm halogen và nhóm kim loại kiềm.

Cấu trúc của hệ thống tuần hoàn không những không bị phá vỡ mà còn hoàn chỉnh hơn, chặt chẽ hơn.

Định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn đã vượt qua thử thách đầu tiên một cách thắng lợi.

Bảng 1.12. Hệ thống tuần hoàn Mendeleep năm 1900
(Sau khi tìm ra các khí trơ)

Chu kì	Nhóm nguyên tố O	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
1	–	Hiđro **H** 1,008		–	–	–	–	-	
2	Heli **He** 4,0	Liti **Li** 7,03	Beri **Be** 9,1	Bo **B** 11,0	Cacbon **C** 12,0	Nitơ **N** 14,01	Oxi **O** 16,00	Flo **F** 19,0	
3	Neon **Ne** 19,9	Natri **Na** 23,05	Magie **Mg** 24,36	Nhôm **Al** 27,1	Silic **Si** 28,2	Photpho **P** 31,0	lưu huỳnh **O** 32,06	Clo **Cl** 35,45	
4	Agon **Ar** 38	Kali **K** 39,15	Canxi **Ca** 40,1	Scanđi **Sc** 44,1	Titan **Ti** 48,1	Vanađi **V** 51,2	Crom **Cr** 52,1	Mangan **Mn** 55,0	Sắt Coban Niken **Fe** **Co** **Ni (Cu)** 55,9 59 59
5		Đồng **Cu** 63,6	Kẽm **Zn** 65,4	Gali **Ga** 70,0	Gemani **Ge** 72,5	Asen **As** 75	Selen **Se** 79,2	Brom **Br** 79,95	
6	Kripton **Kr** 81,8	Rubiđi **Rb** 85,5	Stronti **Sr** 87,6	Ytri **Y** 89,0	Ziriconi **Zr** 90,6	Niobi **Nb** 94,0	Molipđen **Mo** 96,0	–	Ruteni Rođi Palađi **Ru** **Rh** **Pd (Ag)** 101,7 103,6 106,6
7		Bạc **Ag** 107,93	Cađimi **Cd** 12,4	Inđi **In** 115,0	Thiếc **Sn** 119,0	Antimon **Sb** 120,2	Telu **Te** 127	Iot **I** 127	
8	Xenon **Xe** 128	Xesi **Cs** 123,9	Bari **Ba** 132,9	Lantan **La** 138,9	Ceri **Ce** 140,2	-			
9	–	–		–	–	–	--	-	
10	–	–		Ytecbi **Yb** 173	–	Tantan **Ta** 183	Vonfam **W** 184	–	Osimi Iriđi Platin **Os** **Ir** **Pt (Au)** 191 193 194,8
11	-	Vàng **Au** 197,2	Thuỷ ngân **Hg** 200,0	Tali **Tl** 204,1	Chì **Pd** 206,0	Bitmut **Bi** 208,5	–	–	
12	–	–	Rađi **Rd** 225	–	Thori **Th** 232,5	–	Urani **U** 238,5		
	Hợp chất oxit ứng với hoá trị cao nhất								
	R	R_2O	RO	R_2O_3	RO_2	R_2O_5	RO_3	R_2O_7	RO_4
	Hợp chất khí với hiđro								
					RH_4	RH_3	RH_2	RH	

1.3.2. Việc khám phá ra các đồng vị

Tháng 3 năm 1896, nhà bác học Pháp Becquerel khám phá ra hiện tượng phóng xạ.

Tháng 6 năm 1898, với công trình lao động có một không hai, ông bà Pierre Curie và Marie Curie thông báo đã tìm ra poloni (gọi theo tên tổ quốc của Balan của bà Curie là Polonhơ, <Pologne>) và đến tháng mười tìm được rađi (có nghĩa là tia) là hai nguyên tố phóng xạ mới. Một năm sau, cộng tác viên của bà Curie là A.Debern tìm thấy actini, thêm một nguyên tố phóng xạ mới.

Chỉ có trực giác thiên tài và năng lực thực nghiệm hiếm có mới cho phép ông bà Curie giả thuyết rằng *poloni* là nguyên tố tương tự *telu* và *rađi* tương tự *bari*.

Nhưng để chứng minh điều này còn cần phải mất nhiều năm nghiên cứu tỉ mỉ va đa dạng. Chẳng hạn, việc xác định chính xác nguyên tử lượng (khối lượng nguyên tử) của rađi cũng đòi hỏi biết bao công sức. Và ngay cả với hai nguyên tố mới này, Mendeleep cũng đã dự kiến vị trí của chúng trong bảng tuần hoàn : rađi sẽ ở vào vị trí ekabari, còn poloni được tiên đoán với tên gọi là đvitelu.

Còn actini thì một thời gian dài không tìm được chốn nương thân trong bảng tuần hoàn là vì nguyên tố này có vẻ thâm hiểm và khó tính.

Tuy nhiên, như ta đã biết, Mendeleep để ở cuối chu kì 6 và đầu chu kì 7 của hệ thống tuần hoàn một số ô trống : 5 ô giữa bitmut và thori, một ô giữa thori và uran, có đủ chỗ cho 3 nguyên tố phóng xạ mới.

Rồi trong vòng mấy năm sau đã phát hiện ra hàng mấy chục "nguyên tố phóng xạ".

Cac nhà hoá học đã biết nhiều nguyên tố khác nhau rõ rệt về trọng lượng nguyên tử nhưng không khác nhau về tính chất hoá học (trừ tính phóng xạ). Đó là một "nghịch lí", còn "nghịch lí" thứ hai là có không ít trường hợp các nguyên tố phóng xạ có trọng lượng nguyên tử như nhau nhưng không có tính chất hoá học nào chung.

Hệ thống tuần hoàn phải đối mặt với hai câu hỏi hóc búa :

1. Vì sao có hai "nghịch lí" nói trên?

2. Nếu nguyên tắc quan trọng nhất để xây dựng hệ thống tuần hoàn là mỗi ô chỉ dành cho một nguyên tố, vậy khi nhiều nguyên tố có cùng trọng lượng nguyên tử "tranh nhau" một ô trong bảng thì sao?

Trước tình hình đó, nhà bác học Pháp nổi tiếng G. Urbain đã nói : "Tất cả những sự kiện này đã làm lung lay nguyên lí mà Mendeleep đã làm cơ sở cho hệ thống của mình". Nhà bác học Đức V.Tilden nhận xét : "Nếu nói một cách chặt chẽ thì hệ thống tuần hoàn của Mendeleep không chứa được tất cả các nguyên tố đã biết".

1.3.3. *"Những câu hỏi lớn không lời đáp"*

Ngoài hai thử thách lớn nói trên đối với định luật tuần hoàn, còn có nhiều câu hỏi lớn đặt ra cho các nhà bác học mà trình độ khoa học đương thời chưa giải đáp được.

– Hệ thống tuần hoàn phải chứa tất cả bao nhiêu nguyên tố?

– Có nguyên tố nào nhẹ hơn hiđro và nặng hơn urani không? (Urani là nguyên tố nặng nhất đã biết lúc bấy giờ.)

– Có nguyên tố nào đứng giữa hiđro và liti không?

– Số lượng các nguyên tố đất hiếm là bao nhiêu? (Hằng năm, trên các tạp chí hoá học đều có công bố về việc tìm ra một vài nguyên tố đất hiếm mới để rồi sau đó một thời gian ngắn mới vỡ lẽ ra rằng các nhà nghiên cứu đã nhầm!)

Ngay cả chỗ dựa vững chắc của định luật tuần hoàn là trọng lượng nguyên tử đôi khi cũng bị vi phạm. Vì sao trọng lượng nguyên tử Te lớn hơn I mà xếp Te trước I? Co xếp trước Ni?

Chưa có giải đáp vì điều chủ yếu vẫn là chưa rõ bản chất vật lí sâu xa của sự biến thiên tuần hoàn tính chất các nguyên tố là ở chỗ nào.

Chỉ có dưới ánh sáng của lí thuyết cấu tạo nguyên tử, định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn mới vượt qua được những thử thách nêu trên. Định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn chẳng những không bị lung lay mà càng được củng cố vững chắc và sâu sắc hơn.



Hình 1.7. Bà Marie Curie (1867 – 1934) và chồng là Pierre Curie (1859 – 1906)

Ông bà đã tìm ra nguyên tố phóng xạ poloni (Po) và rađi (Ra). Năm 1903, ông bà được giải Nobel về vật lí. Năm 1911, bà Marie được giải Nobel về hoá học do công lao kiệt xuất của bà đóng góp trong lĩnh vực phóng xạ. Bà người đầu tiên, và cho tới nay là người duy nhất được hai lần tặng giải Nobel về khoa học.

Năm 1935, con gái ông bà là Irene Curie và con rể là Joliot Curie được tặng giải Nobel về hoá học.

Năm 1869, Menđeleep công bố bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học. Việc tìm ra định luật tuần hoàn là một trong những phát kiến xuất sắc nhất trong hoá học.



Hình 1.8. D. I. Mendeleep (1834 – 1907)

D.I. Mendeleep được sinh ra ở thành phố Tobôn thuộc miền Tây Sibêri heo lánh của nước Nga. Ông là con út trong một gia đình mười bảy anh chị em. Cha là nhà giáo mất năm ông 13 tuổi. Mẹ ông- bà Maria là một phụ nữ Nga thông minh, nhân hậu, có học thức, đã vượt qua mọi trở lực để ông có được một nền học vấn cao.

2. ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN MENDELEEP

Trong phần trên (mục 1) ta đã xét sơ qua quá trình xây dựng định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn từ đầu thế kỉ XIX cho đến đầu thế kỉ XX khi lí thuyết cấu tạo nguyên tử ra đời.

Trong phần này, ta nghiên cứu nội dung định luật tuần hoàn, cấu trúc của hệ thống tuần hoàn và các quy luật biến đổi tính chất các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

2.1. Định luật tuần hoàn

Định luật tuần hoàn được Mendeleep phát biểu như sau :

" Tính chất của các nguyên tố cũng như tính chất của các đơn chất và hợp chất tạo nên từ các nguyên tố đó, phụ thuộc tuần hoàn vào trọng lượng nguyên tử[1] của chúng."

(1) Được hiểu là khối lượng nguyên tử.

Thực chất của định luật tuần hoàn là : nếu sắp xếp các nguyên tố theo chiều tăng dần của khối lượng nguyên tử thì qua một số nguyên tố nhất định, có sự lặp lại những tính chất hoá học cơ bản (chu kì lặp lại). Như vậy, tính chất hoá học của các nguyên tố là hàm tuần hoàn của khối lượng nguyên tử của chúng.

Nhưng nếu lấy chiều tăng dần của khối lượng nguyên tử làm nguyên tắc sắp xếp thì trong một số trường hợp, để đảm bảo tính tuần hoàn phải đảo chỗ một số nguyên tố, chẳng hạn Ar và K; Co và Ni; Te và I... và như vậy phải vi phạm nguyên tắc trên. Từ đó nảy sinh ra sự cần thiết phải chỉ rõ thứ tự sắp xếp các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn bằng *số thứ tự* hay *số hiệu nguyên tử*.

Cách phát biểu định luật tuần hoàn như trên tồn tại cho đến năm 1913 khi Moseley (Môdơli) tìm cách xác định được điện tích hạt nhân nguyên tử và thấy rằng điện tích hạt nhân trùng với số thứ tự của nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

2.2. Hệ thống tuần hoàn (hay bảng tuần hoàn)

Ta biết rằng có nhiều cách biểu diễn một sự phụ thuộc hàm số : dùng phương trình đại số, phương trình vi phân, đồ thị, bảng v.v...

Từ cuối thế kỉ XIX, đầu thế kỉ XX, người ta đã có nhiều cố gắng đi tìm các biểu thức toán học nhằm thể hiện sự phụ thuộc tuần hoàn giữa tính chất của các nguyên tố và khối lượng nguyên tử (hoặc số thứ tự) của chúng nhưng những cố gắng theo phương hướng đó đều không đạt kết quả.

Cho đến nay, hệ thống tuần hoàn (hoặc bảng tuần hoàn) là cách thể hiện định luật tuần hoàn một cách cụ thể, rõ ràng và sâu sắc nhất.

2.2.1. Cấu trúc của hệ thống tuần hoàn

2.2.1.1. Hệ thống tuần hoàn dạng ngắn

Hệ thống tuần hoàn gồm các ô, các chu kì và các nhóm.

a) Ô : Mỗi nguyên tố được xếp vào một ô. Trong hệ thống tuần hoàn, số thứ tự của ô bằng số hiệu nguyên tử của nguyên tố xếp trong ô đó.

b) Chu kì : Nếu cắt dãy nguyên tố theo thứ tự từ 1 đến 110 (số nguyên tố đã biết hiện nay) từ sau nguyên tố số 2 theo chu kì lặp lại các tính chất (8, 8, 18, 18, 32) ta sẽ được 7 hàng. Ở mỗi hàng như vậy có sự biến đổi liên tục tính chất kim loại, phi kim của các nguyên tố. Mendeleep gọi đó là một chu kì.

Vậy, *Chu kì là một dãy nguyên tố xếp theo số thứ tự tăng dần, mở đầu là một kim loại điển hình, cuối là một phi kim, kết thúc là một khí hiếm (khí trơ).*

Hệ thống tuần hoàn gồm 7 chu kì : 3 chu kì nhỏ và 4 chu kì lớn, trong đó từng đôi chu kì có số nguyên tố bằng nhau được gọi là cặp chu kì.

Bảng 1.14 ghi số chu kì, số nguyên tố trong chu kì và các cặp chu kì.

Bảng 1.13. Hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học (dạng ngắn)

Chu kì	Hàng	Nhóm I	Nhóm II	Nhóm III	Nhóm IV	Nhóm V	Nhóm VI	Nhóm VII	Nhóm VIII			
1	1	H 1 Hidro 1,008										He 2 Heli 4,003
2	2	Li 3 Liti 6,94	Be 4 Beri 9,01	5 Bo 10,81 B	6 Cacbon 12,01 C	7 Nitơ 14,007 N	8 Oxi 15,999 O	9 Flo 18,998 F				Ne 10 Neon 20,18
3	3	Na 11 Natri 22,989	Mg 12 Magie 24,31	13 Nhôm 26,98 Al	14 Silic 28,09 Si	15 Photpho 30,97 P	16 Lưu huỳnh 32,06 S	17 Clo 35,45 Cl				Ar 18 Agon 39,95
4	4	K 19 Kali 39,10	Ca 20 Canxi 40,08	Sc 21 Scandi 44,96	Ti 22 Titan 47,90	V 23 Vanađi 50,94	Cr 24 Crom 51,996	Mn 25 Mangan 54,94	Fe 26 Sắt 55,85	Co 27 Coban 58,93	Ni 28 Niken 58,71	
	5	29 Đồng 63,54 Cu	30 Kẽm 65,38 Zn	31 Gali 69,72 Ga	32 Gemani 72,59 Ge	33 Asen 74,92 As	34 Selen 78,96 Se	35 Brom 79,9 Br				Kr 36 Kripton 83,80
5	6	Rb 37 Rubiđi 85,47	Sr 38 Stronti 87,62	Y 39 Ytri 88,91	Zr 40 Zirconi 91,22	Nb 41 Niobi 92,91	Mo 42 Molipđen 95,94	Tc 43 Tecnexi (99)	Ru 44 Ruteni 101,07	Rh 45 Rođi 102,91	Pd 46 Palađi 106,40	
	7	47 Bạc 107,87 Ag	48 Cađimi 112,41 Cd	49 Indi 114,82 In	50 Thiếc 118,69 Sn	51 Antimon (Stibi) 121,75 Sb	52 Telu 127,60 Te	53 Iot 126,90 I				Xe 54 Xenon 131,30
6	8	Cs 55 Xesi 132,91	Ba 56 Bari 137,31	La 57 Lantan 138,91	Hf 72 Hafni 178,49	Ta 73 Tantan 180,95	W 74 Vonfam 183,85	Re 75 Reni 186,2	Os 76 Osimi 190,20	Ir 77 Iriđi 192,2	Pt 78 Platin 195,09	
	9	79 Vàng 196,967 Au	80 Thuỷ ngân 200,59 Hg	81 Tali 204,37 Tl	82 Chì 207,2 Pb	83 Bitmut 208,98 Bi	84 Poloni (209) Po	85 Atatin (210) At				Rn 86 Radon (222)
7	10	Fr 87 Franxi (223)	Ra 88 Radi 226,025	Ac 89 Actini (227) 90-103	Ku 104 Kusatovi (261)	Ns 105 Ninsbori (261)	106	107	108	109		
Oxit cao nhất		R_2O	RO	R_2O_3	RO_2	R_2O_5	RO_3	R_2O_7	RO_4			
Hợp chất khí với hiđro					RH_4	RH_3	RH_2	RH				

Họ Lantan	Ce 58 140,12 Xeri	Pr 59 140,91 Prazeođim	Nd 60 144,24 Neođim	Pm 61 (147) Prometi	Sm 62 150,35 Samari	Eu 63 151,96 Europi	Gd 64 157,25 Gađolini	Tb 65 158,93 Tebi	Dy 66 162,50 Đysprozi	Ho 67 164,93 Honmi	Er 68 167,26 Ecbi	Tm 69 168,93 Tuli	Yb 70 173,04 Ytecbi	Lu 71 174,97 Lutexi
Họ Actini	Th 90 232,038 Thori	Pa 91 (234) Protactini	U 92 238,03 Urani	Np 93 (237) Neptuni	Pu 94 (244) Plutoni	Am 95 (243) Amerixi	Cm 96 (247) Curi	Bk 97 (247) Beckeli	Cf 98 (251) Californi	Es 99 (254) Ensteni	Fm 100 (253) Fecmi	Md 101 (257) Menđelevi	No 102 (255) Nobeli	Lr 103 (256) Lorenxi

Bảng 1.14. Số chu kì, số nguyên tố trong chu kì và các cặp chu kì

Số chu kì		Số nguyên tố trong chu kì	Số cặp chu kì
Chu kì nhỏ	Chu kì 1	2 nguyên tố	Cặp 1
	Chu kì 2	8 nguyên tố	Cặp 2
	Chu kì 3	8 nguyên tố	
Chu kì lớn	Chu kì 4	18 nguyên tố	Cặp 3
	Chu kì 5	18 nguyên tố	
	Chu kì 6	32 nguyên tố	Cặp 4
	Chu kì 7	24 nguyên tố (còn chưa đủ)	

Qua bảng 1.14, ta thấy thể hiện một số quy luật quan trọng trong cấu trúc của hệ thống tuần hoàn.

– Càng xuống dưới chu kì càng dài.

– Chu kì 2 và 3 đều có 8 nguyên tố.

– Chu kì 4 và 5 đều có 18 nguyên tố.

– Có thể suy ra rằng, số nguyên tố của chu kì 6 và 7 phải bằng nhau và bằng 32, tuy rằng tới nay chu kì 7 chưa kết thúc.

– Số nguyên tố trong các chu kì là 2, 8, 8, 18, 18, 32 tức là bằng 2 lần bình phương của các số nguyên liên tiếp :

$2 = 2 \times 1^2$; $8 = 2 \times 2^2$; $18 = 2 \times 3^2$; $32 = 2 \times 4^2$.

Như vậy, số nguyên tố trong mỗi chu kì bằng hai lần bình phương số cặp.

$$S = 2N^2 \text{ (N là số cặp)}$$

Dựa vào đây cũng có thể suy đoán chu kì 7 sẽ có $2 \times 4^2 = 32$ nguyên tố.

Bây giờ ta xét một số chu kì.

Chu kì nhỏ

– *Chu kì 1* chỉ gồm 2 nguyên tố là hiđro và heli. Do tính chất độc đáo của chu kì 1 nên ở nguyên tố hiđro bao gồm cả tính chất của nguyên tố mở đầu chu kì là một kim loại và của nguyên tố cuối chu kì là một phi kim.

– *Chu kì 2 và 3* (mỗi chu kì gồm 8 nguyên tố). Tính chất của các nguyên tố trong chu kì biến đổi đều đặn, liên tục.

Chu kì lớn

– Một số tính chất của các nguyên tố trong chu kì như tính kim loại, phi kim biến đổi chậm hơn ở các chu kì nhỏ.

Một số tính chất lại biến đổi tuần hoàn trong chu kì, chẳng hạn hoá trị.

Ở chu kì 4, hoá trị của nguyên tố đầu chu kì (K) là 1, rồi tăng đều đặn đến một cực đại ở giữa chu kì (ở Mn có hoá trị 7), sau đó lại tụt dần xuống tới 1 (ở Cu) để rồi lại tăng lên đều đặn tới hoá trị 7 (ở Br). Do đó, mỗi chu kì lớn có thể chia thành hai hàng (trong các bảng tuần hoàn dạng chu kì ngắn).

– *Chu kì 4 và 5* (mỗi chu kì gồm 18 nguyên tố)

Có cấu tạo giống nhau (trong bảng tuần hoàn dạng ngắn mỗi chu kì lớn được chia thành hai hàng : hàng trên gồm 10 nguyên tố, hàng dưới gồm 8 nguyên tố).

– *Chu kì 6* (gồm 32 nguyên tố), có hai đặc điểm :

+ Tính kim loại, phi kim biến đổi chậm hơn ở hai chu kì trước, nhất là từ Ce (số 58) đến Lu (số 71).

+ Tính chất của 14 nguyên tố trên (từ 58 đến 71) rất giống nhau và giống lantan, do đó chúng được xếp chung một ô với lantan và mang tên là *họ Lantan*. Họ Lantan thường được xếp riêng xuống dưới bảng.

– *Chu kì 7* chưa hoàn thành nhưng theo suy đoán ở trên thì cấu tạo phải giống chu kì 6. Ở đây, sau actini (số 89) có 14 nguyên tố từ Th (số 90) đến Lw (số 103) có tính chất rất giống nhau và giống actini nên được xếp chung một ô với actini và mang tên là họ Actini.

Họ Actini thường được xếp xuống dưới bảng và song song từng đôi một với các nguyên tố họ Lantan.

Nhóm

Nếu các chu kì được sắp xếp thành hàng ngang thì các nguyên tố có tính chất giống nhau rõ rệt được xếp thành cột dọc, nguyên tố nọ xếp dưới nguyên tố kia theo chiều tăng của khối lượng nguyên tử.

Mỗi cột như vậy là một nhóm.

Hệ thống tuần hoàn (dạng ngắn) gồm 9 nhóm (bao gồm cả nhóm số không).

Đối với các chu kì lớn, người ta chia các nguyên tố thành hai hàng và cũng xếp vào 9 nhóm.

Bắt đầu từ đây trong một nhóm đã bao gồm những nguyên tố không hẳn là giống nhau về tính chất một cách chặt chẽ. Tuy vậy, ít ra thì chúng cũng có điểm chung : đó là hoá trị dương cao nhất đối với oxi bằng nhau. Vì vậy, mỗi nhóm của hệ thống tuần hoàn lại phải chia thành hai phân nhóm : phân nhóm chính và phân nhóm phụ.

Như vậy, *nhóm là tập hợp các nguyên tố có hoá trị dương cao nhất bằng nhau và bằng số thứ tự của nhóm.*

Còn *phân nhóm là tập hợp các nguyên tố trong một nhóm có tính chất hoá học giống nhau.*

Có hai loại phân nhóm : phân nhóm chính và phân nhóm phụ.

– *Phân nhóm chính :* nguyên tố đầu của phân nhóm chính nằm ở chu kì 2, những nguyên tố sau nằm ở tất cả các chu kì khác.

– *Phân nhóm phụ :* thường chia thành hai loại : phân nhóm phụ loại 1 và phân nhóm phụ loại 2.

+ *Phân nhóm phụ loại 1* : nguyên tố đầu nằm ở chu kì 4, các nguyen tố sau nằm ở tất cả các chu kì khác.

+ *Phân nhóm phụ loại 2* : gồm các nguyên tố họ Lantan và họ Actini xếp dưới bảng.

Từ nhóm I đến nhóm VIII, mỗi nhóm gồm một phân nhóm chính, mọt phân nhóm phụ (loại 1).

Ở các nhóm II, III, IV tính chất của các nguyên tố thuộc hai phân nhóm chính và phụ không khác nhau nhiều lắm; ở các nhóm khác tính chất của chúng rất khác nhau.

Ở nhóm VIII, có điều đáng lưu ý sau : nếu phân chia mỗi chu kì lớn 18 nguyên tố thành hai hàng – hàng đầu 10 nguyên tố – mà hệ thống tuần hoàn chỉ có 8 nhóm (không kể nhóm số không) thì phải xếp 3 nguyên tố vào một nhóm : nhóm VIII. Có ba "bộ ba" nguyên tố như vậy : đó là Fe, Co, Ni; Ru, Rh, Pd; Os, Ir, Pt. Thật ra việc sắp xếp như trên cũng có cơ sở đúng đắn : các "bộ ba" đó có tính chất giống nhau theo hàng ngang còn nhiều hơn là theo cột dọc. Như vậy, ở nhóm VIII có ba phân nhóm phụ loại 1.

Đúng ra thì các khí hiếm (khí trơ) thuộc phân nhóm chính nhóm VIII. Do từ trước người ta chưa tìm được các hợp chất của khí trơ và vẫn coi chúng có hoá trị không nên thường loại chúng ra khỏi nhóm VIII và xếp vào nhóm không (tức là nhóm thứ 9 trong hệ thống tuần hoàn).

Phân nhóm phụ loại 2 gồm 14 nguyên tố họ Lantan và 14 nguyên tố họ Actini. Chúng tạo thành 14 phân nhóm phụ (loại 2), mỗi phân nhóm gồm 2 nguyên tố : một nguyên tố thuộc họ Lantan, một nguyên tố họ Actini. Nguyên tố đầu của mỗi phân nhóm nằm ở chu kì 6.

Như vậy, hệ thống tuần hoàn gồm 8 phân nhóm chính (không kể nhom số không), 10 phân nhom phụ loại 1 và 14 phân nhóm phụ loại 2.

Ta cũng nhận thấy rằng : khi xuất hiện một chu kì chẵn (2, 4, 6) thì cũng xuất hiện một phân nhóm mới (chính, phụ loại 1, phụ loại 2).

2.2.1.2. Hệ thống tuần hoàn dạng chu kì dài

Sau khi hệ thống tuần hoàn của Mendeleep được công bố năm 1871, nhiều nhà khoa học đã đề xuất nhiều kiểu bảng tuần hoàn khác. Trong số các kiểu bảng đo thì có ưu thế hơn cả và phổ biến hơn cả là kiểu bảng tuần hoàn dạng chu kì dài (hay gọi tắt là dạng dài) do nhà khoa học Thuỵ Sĩ là Werner lần đầu tiên đề xuất vào năm 1905.

Bảng 1.15. Bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học (dạng dài)

Nhóm	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
Chu kì 1	1 H																	2 He
Chu kì 2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
Chu kì 3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
Chu kì 4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
Chu kì 5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
Chu kì 6	55 Cs	56 Ba	57* La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Ra
Chu kì 7	87 Fr	88 Ra	89** Ac	104 Ku	105 Ha	106	107	108	109									

* Họ Lantan	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
** Họ Actini	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lw

Chu kì

Trong hệ thống tuần hoàn dạng dài, tất cả các chu kì (nhỏ và lớn) đều được sắp xếp thành một hàng.

Nhóm

Hệ thống tuần hoàn dạng dài gồm 18 cột chia ra làm 8 nhóm A, đánh số từ IA đến VIIIA và 8 nhóm B đánh số từ IB đến VIIIB.

Mỗi nhóm A hoặc B đều gồm 1 cột, riêng nhóm VIIIB gồm 3 cột.

Trong hệ thống tuần hoàn dạng dài, 8 nhóm A tương ứng với 8 phân nhóm chính trong bảng dạng ngắn và 8 nhóm B tương ứng với 10 phân nhóm phụ trong bảng dạng ngắn.

2.2.1.3. Nhận xét về hệ thống tuần hoàn dạng ngắn và dạng dài

Hệ thống tuần hoàn dạng ngắn có ưu điểm là gọn, thấy được sự liên quan giữa các nguyên tố thuộc phân nhóm chính và phân nhóm phụ, thấy được sự biến đổi tuần hoàn tính chất các nguyên tố trong cùng một chu kì (chu kì lớn).

Tuy nhiên, đứng về mặt xây dựng hệ thống tuần hoàn trên cơ sở cấu trúc vỏ electron thì dạng dài có nhiều thuận lợi hơn.

2.3. Quy luật biến đổi tính chất của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn

2.3.1. Sự biến đổi theo chu kì (hàng ngang)

Trong tất cả các chu kì đều cùng có một quy luật biến đổi tính chất của các nguyên tố : khi số thứ tự của nguyên tố tăng lên thì tính kim loại giảm dần, đồng thời tính phi kim tăng dần và kết thúc là một khí hiếm (khí trơ).

Tuy nhiên, khi số nguyên tố trong chu kì càng lớn, sự thể hiện quy luật trên càng phức tạp hơn.

2.3.2. Sự biến đổi theo nhóm

Trong các nhóm, sự biến đổi tính chất của các nguyên tố trong từng phân nhóm có khác nhau :

– Đối với các nguyên tố thuộc phân nhóm chính, theo chiều từ trên xuống dưới, khi số thứ tự tăng thì tính phi kim ngày càng giảm, đồng thời tính kim loại ngày càng tăng.

– Đối với các nguyên tố thuộc phân nhóm phụ, theo chiều từ trên xuống dưới, có khi tính kim loại không tăng hoặc giảm đi chút ít.

2.3.3. Sự biến đổi theo hướng chéo

Mỗi dãy nguyên tố nằm trên đường chéo của hệ thống tuần hoàn gồm các nguyên tố thuộc các nhóm khác nhau : chúng có hoá trị khác nhau, công thức của các hợp chất khác nhau .... tuy nhiên, chúng có tính chất hoá học gần nhau.

Bảng 1.16. Các dãy nguyên tố nằm trên đường chéo của hệ thống tuần hoàn

Chất điện môi — tính oxi hoá

Chất bán dẫn — lưỡng tính

Kim loại — tính khử

Li	Be	B	C	N	O	F
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At
Fr	Ra					

Ví dụ 1 : Li ở nhóm I nhưng tính chất của nó lại gần gũi với Mg hơn là với các nguyên tố khác trong nhóm kim loại kiềm.

Ví dụ 2 : Tất cả các nguyên tố nằm trên đường chéo : Be, Al, Ge, Sb, Po đều thể hiện tính lưỡng tính.

Ví dụ 3 : Tất cả các nguyên tố C, P, Se, I trên hướng chéo đều có oxit là oxit axit, mặc dù chúng có công thức và hoá trị khác nhau trong các hợp chất với oxi : CO_2, P_2O_5, SeO_3, I_2O_7.

2.3.4. Sự biến đổi tuần hoàn một số tính chất lí học

Ngoài những tính chất hoá học cơ bản như hoá trị, tính kim loại, phi kim, thành phần và tính chất hoá học của các oxit, hiđroxit, các hiđrua ... người ta còn nhận thấy nhiều tính chất vật lí của các đơn chất và hợp chất cũng biến đổi tuần hoàn như nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi, từ tính, sinh nhiệt của một số hợp chất...

CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP

1.1. Các công trình phân hạng các nguyên tố của các nhà bác học trước Mendeleep có phải là vô ích không? Có chứa đựng một số chân lí nào không? Hãy nêu một số dẫn chứng.

1.2. Hãy nêu lên sự liên quan giữa định luật tuần hoàn và hệ thống tuần hoàn.

1.3. Hãy nêu những nguyên tắc xây dựng hệ thống tuần hoàn

1.4. Giả sử các nguyên tố Ga, Se, Ge chưa được tìm ra. Anh (chị) dựa vào các quy luật biến đổi tính chất của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn hãy mô tả (càng tỉ mỉ càng tốt) :

- Khối lượng nguyên tử.
- Tỉ khối.
- Tính chất vật lí.

Tính chất hoá học của đơn chất, cũng như hợp chất của chúng.

- Sau đó, hãy đối chiếu với những dữ kiện thực nghiệm đã biết về các nguyên tố đó để xem lại dự đoán của anh (chị) đúng đến mức nào?

1.5. Lấy ví dụ minh hoạ và giải thích vì sao các nguyên tố nằm trên đường chéo của hệ thống tuần hoàn lại có tính chất hoá học gần nhau.

PHẦN HAI

ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN DƯỚI ÁNH SÁNG CỦA LÍ THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

... Tôi không rõ nguyên nhân của sự biến đổi tuần hoàn...

Mendeleep – 1889

... Sự biến đổi tuần hoàn cấu hình electron của các nguyên tử chính là nguyên nhân của sự biến đổi tuần hoàn tính chất của các nguyên tố.

Niels Bohr – 1916

1. BIÊN NIÊN SỬ NGẮN GỌN VỀ NHỮNG SỰ KIỆN QUAN TRỌNG NHẤT TRONG QUÁ TRÌNH NHẬN BIẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

1.1. Việc tìm ra electron

Năm 1832, Faraday nhận thấy rằng khi cho dòng điện đi qua một dung dịch chất điện li thì thấy khối lượng chất được giải phóng ra tỉ lệ với cường độ dòng điện và thời gian dòng điện đi qua.

Từ thí nghiệm đó, ông rút ra kết luận rằng ion là những chất mang điện và điện tích những ion đó đều là bội số của một điện tích nhỏ nhất nào đó.

Nhà khoa học Anh Stoney đề nghị gọi điện tích nhỏ nhất đó là electron.

– Năm 1897, khi phóng điện với thế hiệu cao (≈ 15000 Von) vào hai đầu một ống thuỷ tinh kín, trong đó còn rất ít không khí (p = 0,001 mmHg), nhà bác học Anh J.Thompson (1856 – 1940) tạo ra được tia âm cực.

Tia âm cực gồm những hạt mang điện tích âm, ông đặt tên là electron (hay điện tử) theo đề nghị trước đó của Stoney.



Hình 2.1. J.J. Thompson (trái) và Rutherford

– Thompson (1856 – 1940), nhà vật lí học Anh, là người đã *phát hiện ra hạt electron* (giải Nobel 1906). Con trai ông G.Thompson (1892 – 1975) đã khám phá ra sự nhiễu xạ electron qua tinh thể kim loại (giải Nobel 1937).

– Rutherford (1871 – 1937), nhà vật lí học Anh, là học trò của Thompson, đã phát hiện ra hạt nhân nguyên tử (giải Nobel 1908). Dưới sự hướng dẫn của ông, sau này 10 cộng tác viên của ông cũng được nhận giải Nobel.

Ảnh chụp năm 1920 tại trường Đại học Cambrige, khi Rutherford kế tục sự nghiệp của thầy mình, điều khiển phòng thí nghiệm Cavendish.

Một trong những kết quả quan trọng nhất trong thí nghiệm của Thompson là xác định được tỉ số giữa điện tích của electron (e) và khối lượng của nó (m).

$$\frac{e}{m} = -1{,}75881962 \times 10^{8} \text{ culong/ gam.}$$

- Năm 1909, bằng thí nghiệm "giọt dầu" nổi tiếng, nhà bác học Mỹ Millikan đã xác định được điện tích của electron là

$$e = -1{,}6021773 \times 10^{-19} \text{ culong.}$$

Kết hợp với tỉ số $\frac{e}{m}$ của Thompson, khối lượng của electron được xác định là:

$$m_e = 9{,}1093897 \times 10^{-28} \text{ gam.}$$

Như vậy, khối lượng của electron bằng $\frac{1}{1840}$ khối lượng của nguyên tử hiđro, là nguyên tử nhẹ nhất.



Hình 2.2. R.A. Millikan (1868 – 1953)

Nhà vật lí Mỹ, đã xác định bằng thực nghiệm điện tích của electron, giải Nobel năm 1923.

1.2. Mô hình nguyên tử hạt nhân của Rutherford

Năm 1911, nhà bác học Anh Rutherford và các học trò là Geiger và Marden đã tiến hành một thí nghiệm nổi tiếng: chiếu một chùm hạt α xuyên qua một lá vàng mỏng ($\approx 10^{-6}$ m) và quan sát đường đi của chùm α đó.

Kết quả thí nghiệm chứng tỏ rằng:

- Nguyên tử có cấu tạo rỗng.
- Ở trung tâm nguyên tử, các hạt tích điện dương tập trung trong một thể tích rất nhỏ gọi là hạt nhân nguyên tử, còn các electron chuyển động xung quanh hạt nhân theo các quỹ đạo tròn (mẫu nguyên tử hạt nhân của Rutherford).

Từ thực nghiệm, Rutherford tính được đường kính nguyên tử vào khoảng 10^{-10} m (1Å) còn đường kính hạt nhân nguyên tử vào khoảng 10^{-14} m (10^{-4} Å), nghĩa là nhỏ hơn bán kính nguyên tử gần 10 000 lần.

Cũng như mọi phát minh khác trong khoa học, mẫu nguyên tử của Rutherford làm nảy sinh nhiều câu hỏi, chẳng hạn:

- Vì sao các electron không rơi vào hạt nhân do sức hút của hạt nhân mang điện tích dương với các electron mang điện tích âm?

- Các electron được sắp xếp như thế nào trong nguyên tử?

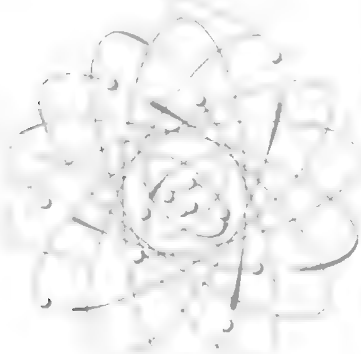
1.3. Mô hình nguyên tử Bohr

Dựa vào thuyết lượng tử của các nhà bác học Đức Max Planck (1858 – 1947) đề xướng năm 1900, nhà vật lí học trẻ tuổi N. Bohr người Đan Mạch, đã xây dựng mẫu nguyên tử Bohr.

Mẫu nguyên tử Bohr đã khắc phục được những khó khăn của mẫu Rutherford và thành công rực rỡ trong việc giải thích các dữ kiện thực nghiệm về quang phổ.

Mặc dù những công trình khoa học xuất sắc của N. Bohr đã dẫn dắt khoa học đi đúng hướng nhưng ông cũng nhanh chóng nhận ra những hạn chế của mình.

Về sau, ông cùng nhiều nhà khoa học khác đã phát triển một mô hình cấu tạo nguyên tử hoàn thiện hơn : đó là mô hình cấu tạo nguyên tử theo cơ học lượng tử.



Hình 2.3. Mô hình nguyên tử của Bohr



Hình 2.4. Từ trái sang phải:

Niels Bohr (1885 – 1962), nhà vật lí Đan Mạch và Max Planck (1858 – 1947), nhà vật lí Đức.

Năm 1900, Max Planck khởi xướng lí thuyết lượng tử và nhận giải Nobel năm 1918.

Bohr là học trò của học trò của Thompson và sau đó là học trò của Rutherford. Vận dụng những thành tựu vĩ đại của cả ba thầy trò, ông đã đặt nền móng cho lí thuyết hiện đại về cấu tạo nguyên tử.

N.Bohr là một trong những khuôn mặt sáng giá nhất trong khoa học thế kỉ XX. Ông được tặng giải Nobel năm 1922 và dưới sự điều khiển của ông, 7 cộng tác viên của ông sau này đã được nhận giải Nobel, trong đó có những tên tuổi lẫy lừng như Heisenberg, Pauli, Pauling...



Hình 2.5. Albert Einstein năm 1920 (1879 –1955)

Albert Einstein (1879 – 1955) là nhà vật lí học Đức, tác giả thuyết photon về ánh sáng và đặc biệt là thuyết tương đối có ảnh hưởng sâu sắc đến sự phát triển của khoa học hiện đại. Ông nhận giải Nobel năm 1921. Ông được coi là nhà bác học vĩ đại nhất của thế kỉ XX.

1.4. Cấu tạo nguyên tử theo cơ học lượng tử

– Năm 1905, Albert Einstein, nhà bác học người Đức gốc Do Thái dùng hiệu ứng quang điện đã chứng tỏ được rằng: ánh sáng (vẫn được coi là có những *đặc tính của sóng*) cũng có thể có những đặc tính của hạt.

Do công trình này ông được tặng giải Nobel năm 1921.

Sự kiện trên làm cho nhà vật lí học người Pháp là Louis de Broglie phải suy nghĩ: Nếu ánh sáng có khi thể hiện tính chất sóng, đôi khi lại thể hiện tính chất hạt thì tại sao vật chất lại không có tính chất tương tự?

– Năm 1925, Louis de Broglie đã phát biểu một tư tưởng táo bạo: *tất cả các hạt vật chất (trong đó có electron) chẳng những có tính chất hạt mà còn có cả tính chất sóng.*

Chẳng hạn, một electron có khối lượng là m, chuyển động với tốc độ v, sẽ có độ dài sóng λ (lăm đa), theo phương trình :

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

h là hằng số Planck có giá trị bằng :

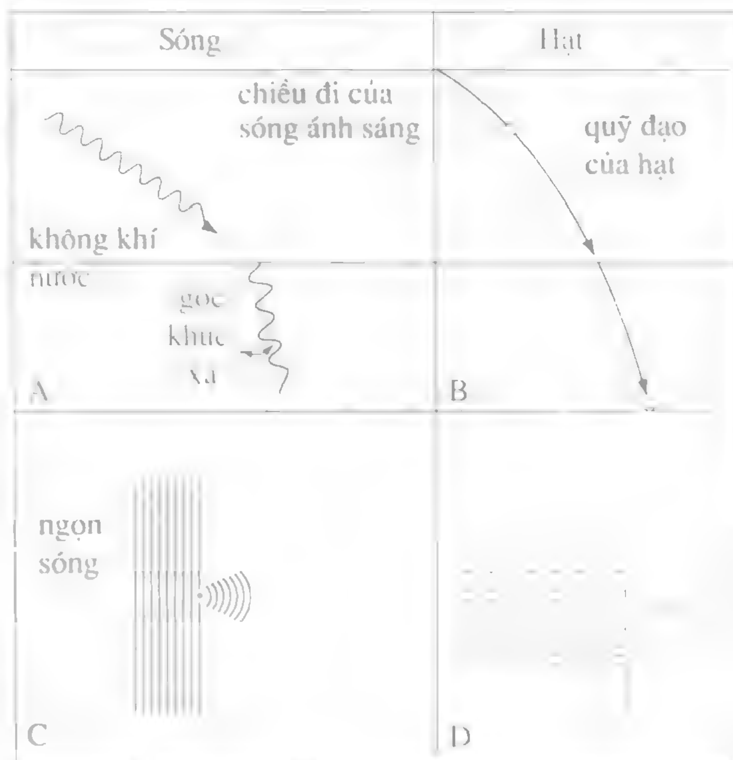
$$h = 6,6260755 \times 10^{-34} \text{ Js (một số rất nhỏ)}$$

Hai năm sau, Davisson và Germer bằng thực nghiệm đã chứng tỏ được rằng, electron bị nhiễu xạ qua tinh thể cũng tương tự sóng ánh sáng.



Hình 2.6. Công tước Louis de Broglie (1891 – 1987) nhà vật lí học Pháp, là một trong những nhà bác học sáng lập ra Cơ học lượng tử. Giải Nobel năm 1929.

Do công trình trên Louis de Broglie được tặng giải Nobel năm 1929, Davisson và Germer nhận giải thưởng Nobel năm 1937.



Hình 2.7. Tính chất khác nhau giữa sóng và hạt

A. Một sóng ánh sáng từ không khí vào nước bị khúc xạ (gãy thành một góc).

B. Ngược lại, một hạt (chẳng hạn một viên sỏi) đi qua mặt nước tạo thành một đường cong do trọng lực và sức cản của nước làm nó rơi chậm lại.

C. Một sóng bị nhiễu xạ qua một lỗ nhỏ làm phát sinh những vòng sóng ở phía bên kia.

(Các đường thẳng trong hình C biểu thị các ngọn sóng khi nhìn từ trên xuống.)

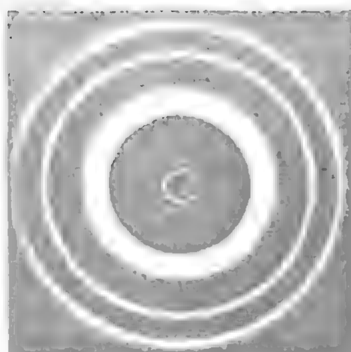
D. Ngược lại, khi một chùm hạt tới gần một lỗ nhỏ (chẳng hạn khi ném một nắm cát ném vào lỗ trong một lá chắn thì một số hạt cát đi qua lỗ và tiếp tục con đường của chúng).

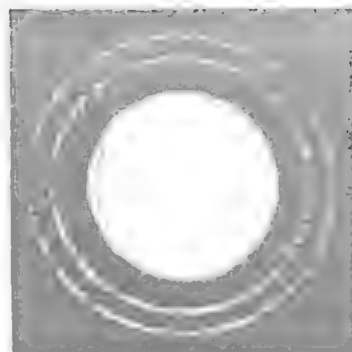
Hình 2.8. Sự nhiễu xạ của tia X và của electron

A. Ảnh nhiễu xạ của tia X qua lá kim loại mỏng.

B. Ảnh nhiễu xạ của electron qua lá kim loại mỏng.

Electron thể hiện tính chất sóng tương tự tia X là sóng điện từ.





Vì electron có tính chất sóng nên có thể mô tả chuyển động của nó trong nguyên tử bằng phương trình sóng.

Năm 1926, nhà vật lí học người Áo E. Schrodinger đã tìm ra phương trình sóng là phương trình cơ bản của cơ học lượng tử:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E + \frac{Ze^2}{r})\Psi = 0$$

Trong đó:

m là khối lượng electron;

r là khoảng cách từ electron tới hạt nhân;

e là điện tích của electron;

E là năng lượng toàn phần của electron, bằng tổng động năng và thế năng.

Z là điện tích hạt nhân.

π là số pi.

h là hằng số Planck.

x, y, z là các toạ độ của electron.

Đại lượng Ψ (đọc là pxi) được gọi là hàm sóng, đặc trưng cho xác suất. Đó là xác suất để electron có thể tồn tại ở một vị trí xác định trong không gian quanh hạt nhân. Nếu Ψ = 1, điều đó có nghĩa là electron thực tế có thể tồn tại ở chính vị trí đó; còn nếu Ψ = 0, ở đấy hoàn toàn không có electron.



Hình 2.9. E.Schrodinger (1887 – 1961)

E.Schrodinger là nhà vật lí người Áo. Năm 1928, ông kế vị Max Planck làm giáo sư vật lí tại Đại học Berlin.

Ông đã tìm ra phương trình Schrodinger là phương trình cơ bản của cơ học lượng tử. Ông nhận Giải Nobel năm 1933.

– Năm 1927, nhà vật lí học người Đức là Werner Heisenberg phát biểu *nguyên lí bất định*:

Không thể biết chính xác đồng thời vị trí và tốc độ của một tiểu phân.

$\Delta x \cdot \Delta u \geq \frac{h}{2\pi}$; Δx: bất định về vị trí; Δu: bất định về tốc độ.

Chẳng hạn, nếu một electron chuyển động gần hạt nhân nguyên tử với tốc độ $6 \cdot 10^6$ m/s (6000 km/s) với độ chính xác là 1% thì sự bất định về vị trí là 10^{-9} m, khoảng 10 lần lớn hơn bán kính của toàn nguyên tử (là 10^{-10} m), do đó ta không thể có ý niệm chính xác electron khu trú ở chỗ nào trong nguyên tử.

Như vậy, ta không thể ấn định *đường đi cố định cho electron* như là *quỹ đạo* tròn trong mô hình của Bohr mà chỉ có thể biết xác suất tìm thấy electron trong khu vực không gian đã cho.

Khái niệm về xác suất tìm thấy electron là khái niệm trung tâm của cơ học lượng tử. Đại lượng hàm Ψ (nói chính xác hơn bình phương của đại lượng đó Ψ^2) trong phương trình Schrodinger nói trên biểu diễn xác suất tồn tại của electron ở một điểm trong không gian.



Hình 2.10. Werner Heisenberg (1901 – 1976)

Werner Heisenberg (1901 – 1976 [illegible] là N. Bohr. Ông được tặng giải Nobel năm 1932 do những công trình về cơ học lượng tử.

1.5. Hạt nhân nguyên tử

Năm 1919, Rutherford và Chadwick phát hiện ra hạt *proton* khi bắn phá các nguyên tử bằng hạt α



$X \rightarrow X^+ + e$

Nếu X là H thì $H \rightarrow H^+$ (proton) + e

Proton là một hạt cơ bản có điện tích bằng và trái dấu với điện tích của electron, khối lượng của proton bằng 1836 lần khối lượng của electron.

– Năm 1932, Chadwich mới tìm ra hạt cơ bản thứ ba là *notron* khi dùng các hạt α có năng lượng cao bắn phá các nguyên tử beri.

Notron là một phần tử không mang điện với khối lượng hơi lớn hơn proton.

J. Chadwick được tặng Giải Nobel năm 1935 do công lao tìm ra notron.

Với phát kiến trên, hình ảnh của hạt nhân nguyên tử đã được hoàn tất: Hạt nhân của tất cả các nguyên tử đều được tạo nên từ các hạt proton và notron (trừ trường hợp hạt nhân nguyên tử hiđro chỉ gồm có proton).

Như vậy là, trong mấy thập kỉ cuối thế kỉ XIX, đầu thế kỉ XX đã nở ra những phát minh lớn trên con đường nhận biết cấu tạo nguyên tử. Nhiều thế hệ các nhà bác học nối tiếp nhau, trò kế tục thầy, đưa khoa học bước sang một kỉ nguyên mới và đúng như lời phát biểu của Rutherford :

"Khoa học tiến theo từng bước và bất cứ nhà khoa học nào cũng thừa hưởng công trình của những người đi trước..."

Trong số các nhà bác học nói trên nổi bật lên hai gương mặt, đó là :

- Nhà vật lí học Đan Mạch Max Planck, người khai sáng ra thuyết lượng tử.
- Albert Einstein, người Đức gốc Do Thái, cha đẻ của thuyết tương đối.

Về thuyết lượng tử

Quan niệm về nguyên tử đã được nêu lên từ thời cổ và cuối cùng đã được chứng minh trực tiếp bằng vật lí vào cuối thế kỉ XIX.

Nhưng không có ai dám nghĩ rằng năng lượng có tính chất lượng tử, tức là cũng có thể chia thành từng phần nhỏ nhất, không thể chia được nữa. Các thí nghiệm vật lí thế kỉ XIX cho thấy năng lượng, chẳng hạn bức xạ nhiệt, bức xạ điện từ ... đều mang tính chất sóng giống như những dòng chảy liên tục, không rời rạc, không thể "đếm được".

Ấy thế mà Max Planck sau rất nhiều bế tắc khi phải đối mặt với kết quả thí nghiệm vật lí về quang phổ vật thể đen, đã trăn trở, dằn vặt, đắn đo ... mãi rồi mới đi đến một quyết định cách mạng mà chính ông cũng không tưởng tượng nổi!

Phải coi năng lượng là "đếm được". Giống như vật chất – vật thể, năng lượng cũng được cấu tạo bởi những thành phần nhỏ nhất, không thể phân chia được nữa.

Và thay vì gọi những thành phần nhỏ nhất đó là "hạt năng lượng" hay "nguyên tử năng lượng", Planck đã sáng tạo ra thuật ngữ độc đáo "quantum", một từ gốc La tinh tức là "lượng tử" với độ lớn của lượng tử năng lượng $\varepsilon = h\nu$.

Từ một giả thiết của Planck nêu lên năm 1900, Einstein đã phải đấu tranh suốt 20 năm liên tục, một mình đơn độc, để chứng minh rằng nó không phải chỉ là một giả thiết tình thế mà là một quy luật phổ quát của tự nhiên, và giờ đây đã được các tài năng của các thế hệ trẻ phát triển lên đỉnh cao.

Thuyết lượng tử đã mở màn cho những biến đổi mau lẹ chưa từng có trong lịch sử khoa học thế kỉ XX, dẫn tới cuộc cách mạng ứng dụng bản chất lượng tử của vật chất : cấu tạo chất, computer, lade, kính hiển vi điện tử, internet, điện thoại di động v.v...

Về thuyết tương đối

Một trong những công trình thần kì mà Einstein để lại cho hậu thế là thuyết tương đối rộng, theo đó những khái niệm rất quen thuộc với lí trí con người như không gian, thời gian, vật chất, năng lượng mà ta tưởng như riêng lẻ, độc lập nhau thực ra chỉ là những khía cạnh của một thực thể duy nhất, bất khả phân ; chúng gắn quyện với nhau, không có cái này thì cũng không có cái kia.

Giả thử như mọi vật chất trên đời biến mất thì theo Newton, ta vẫn còn có cái không gian rỗng tuếch, phẳng lặng, mênh mang mà mũi tên thời gian lặng lẽ trôi ; nhưng theo Einstein thì chẳng còn chi hết, cả không gian, thời gian và vật chất.

Một công trình vĩ đại khác của Einstein là thuyết tương đối hẹp với công thức $E = mc^2$ mà đâu đâu cũng thấy, ai ai cũng nghe nói đến, nó liên kết năng lượng khổng lồ với khối lượng nhỏ xíu với ấn tượng thảm khốc của hai quả bom hạt nhân ném xuống Hiroshima và Nagasaki.

Ý nghĩa vật lí của công thức trên là : Khối lượng m của vật chất chỉ là sự tích tụ năng lượng (chia cho c^2) của vật chất khi nó không di động.

Một công trình vĩ đại khác của Einstein là tính lưỡng tính vừa sóng, vừa hạt của ánh sáng và các vật thể vi mô qua hiệu ứng quang điện, mở đầu cho vật lí lượng tử.

Kì lạ thay! Hai khám phá vĩ đại nhất của thế kỉ XX là được đặc trưng bằng 2 công thức đơn giản nhất :

$\varepsilon = h\nu$ cho thuyết lượng tử

$E = mc^2$ cho thuyết tương đối

Với hai hằng số phổ quát trong trời đất : hằng số Planck cho thế giới vô cùng nhỏ và tốc độ của ánh sáng c cho thế giới vô cùng lớn.

Thế giới chưa bao giờ chứng kiến sự phát triển bùng nổ như thế vào đầu thế kỉ XX.

2. SỰ LIÊN QUAN GIỮA ĐIỆN TÍCH HẠT NHÂN NGUYÊN TỬ VÀ VỊ TRÍ CỦA CÁC NGUYÊN TỐ TRONG HỆ THỐNG TUẦN HOÀN

Năm 1913, nhà bác học Hà Lan là Van den Brook nêu lên giả thuyết : Điện tích hạt nhân nguyên tử của bất kì nguyên tố nào về trị số bằng thứ tự của nguyên tố đó trong hệ thống tuần hoàn.

Giả thuyết của Brook hầu như ngay sau đó đã được khẳng định bằng thực nghiệm. Cũng trong năm 1913, nhà vật lí học người Anh là J.Moseley đã chứng tỏ được rằng độ dài sóng của bức xạ tia X phụ thuộc vào số thứ tự của nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn. $\sqrt{\frac{1}{\lambda}} = A\,(Z - S)$

λ : độ dài sóng tia X; Z : điện tích hạt nhân; A,S : là những hằng số.

Sau khi đo độ dài sóng λ bằng thực nghiệm, có thể xác định được điện tích hạt nhân Z(1), số này đúng bằng số thứ tự của nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

(1) Ta biết rằng proton mang một điện tích dương $e_0 = +1{,}602\times10^{-19}$culong. Nếu hạt nhân có Z proton thì điện tích hạt nhân sẽ là :

$$q = 1{,}602\times10^{-19} = Ze_0$$

Z là một số nên được gọi là *số điện tích hạt nhân*. Như vậy, số điện tích hạt nhân chính bằng số proton. Z = số điện tích hạt nhân = số proton.

Trong bài này, khi nói điện tích hạt nhân Z được hiểu là số điện tích hạt nhân.

Như vậy, vấn đề đã rõ ràng : các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn được sắp xếp theo chiều tăng dần của điện tích hạt nhân nguyên tử, đồng thời là số thứ tự trong hệ thống tuần hoàn. Mỗi nguyên tử ứng với một điện tích hạt nhân nguyên tử hoàn toàn xác định : nó quy định số electron trong lớp vỏ nguyên tử trung hoà và chính lớp vỏ electron này lại quyết định tính chất hoá học của nguyên tố.

Ngày nay, người ta đã biết nhiều dạng nguyên tử có điện tích hạt nhân như nhau và do đó có tính chất hoá học tương tự nhau, mặc dù chúng có khối lượng nguyên tử khác nhau (*các đồng vị*). Ngược lại, người ta biết nhiều dạng nguyên tử có khối lượng nguyên tử như nhau nhưng do điện tích hạt nhân khác nhau nên tính chất hoá học cũng khác nhau. Chẳng hạn, $_{88}Ra^{228}$ và $_{89}Ac^{228}$ v.v...

Các nguyên tố đó được gọi là *đồng lượng.*

Từ đó, ta thấy rằng không có mối liên hệ trực tiếp giữa tính chất hoá học của một nguyên tố và khối lượng nguyên tử của nó. Tính chất của các nguyên tố là hàm số tuần hoàn của điện tích hạt nhân nguyên tử của chúng. Từ đó, định luật tuần hoàn được phát biểu như sau :

Tính chất của các nguyên tố phụ thuộc tuần hoàn vào điện tích hạt nhân nguyên tử (đồng thời là số thứ tự) của nguyên tố đó.

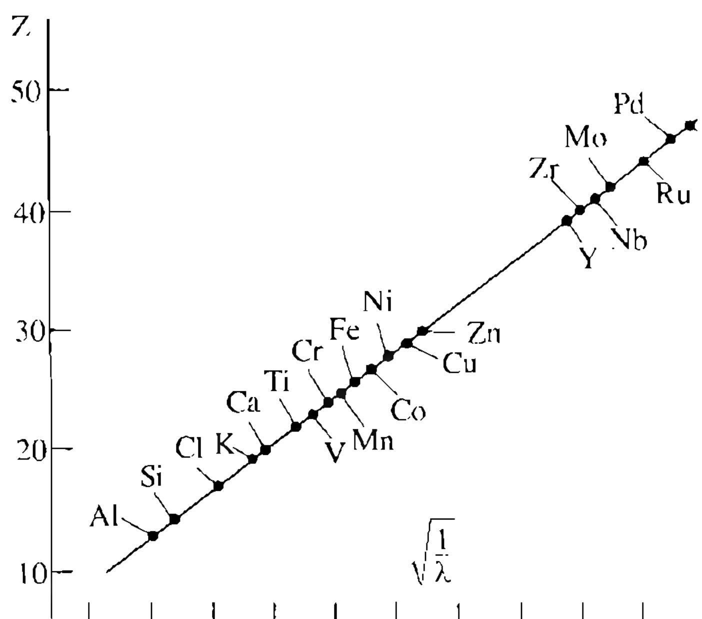
Tuy nhiên, có điều đáng chú ý là khi điện tích hạt nhân tăng lên (tăng số proton) thì số nơtron cũng tăng lên do đó khối lượng trung bình của các đồng vị cũng tăng lên tức là tăng khối lượng nguyên tử. Chính vì vậy mà Menđeleep đã khám phá ra định luật tuần hoàn khi lấy khối lượng nguyên tử làm cơ sở.



Hình 2.11. Moseley (1887 – 1915)

Moseley (1887 – 1915) là nhà vật lí người Anh, một trong những cộng tác viên xuất sắc của Rutherford. Năm 1913, ông đã xác định bằng thực nghiệm điện tích hạt nhân nguyên tử Z của một nguyên tố, về trị số bằng số thứ tự của nguyên tố đó trong hệ thống tuần hoàn.

Sự nghiệp khoa học của ông rất ngắn ngủi. Ông bị động viên vào quân đội Anh trong Thế chiến thứ hai và tử trận tại Gallipoli (Thổ Nhĩ Kì) năm 1915, lúc ấy ông mới tròn 28 tuổi!



Hình 2.12. Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc tuyến tính của căn bậc hai số nghịch đảo của bước sóng (λ) tia X (trong quang phổ tia X) với điện tích hạt nhân nguyên tử của các nguyên tố.

Vì trong hạt nhân nguyên tử, số proton và số notron không tăng theo tỉ lệ nhất định nên trong một số ít trường hợp, sự tăng khối lượng nguyên tử không theo cùng trật tự với sự tăng điện tích hạt nhân.

Trong hệ thống tuần hoàn, có bốn cặp nguyên tố ($_{18}Ar$ và $_{19}K$; $_{27}Co$ và $_{28}Ni$; $_{52}Te$ và $_{53}I$; $_{90}Th$ và $_{91}Pa$) bị coi là "ngoại lệ". Trong mỗi cặp, nguyên tố đứng trước có khối lượng nguyên tử hơi lớn hơn nguyên tố đứng sau, mặc dù điện tích hạt nhân của nguyên tử đứng trước nhỏ hơn một đơn vị.

Bảng 2.1. Các đồng vị của agon và kali

	Điện tích hạt nhân	Khối lượng nguyên tử của các đồng vị	Tỉ lệ % các đồng vị tự nhiên	Khối lượng nguyên tử của nguyên tố
Ar	18	36 38 40	0,337 0,063 99,60	39,948
K	19	39 40 41	93,08 0,012 6,91	39,012

Qua bảng trên ta thấy, đối với Ar, tỉ lệ đồng vị nặng Ar^{40} chiếm tới 99,60%, trong khi tỉ lệ đồng vị nhẹ của K^{39} lại là ưu thế, nó chiếm tới 93,08%. Vì vậy, khối lượng nguyên tử trung bình của Ar là 39,948 hơi lớn hơn K (39,012), mặc dù điện tích hạt nhân của Ar là 18, của K là 19.

Đối với các cặp khác cũng tương tự.

Nếu xếp các nguyên tố theo chiều tăng của điện tích hạt nhân thì thứ tự trên là tự nhiên, "ngoại lệ" trên không còn là ngoại lệ nữa.

Như vậy, trong hệ thống tuần hoàn, điện tích hạt nhân tăng liên tục từ 1 đến 110 (đây chưa phải là giới hạn cuối cùng), đồng thời điện tích hạt nhân cũng xác định vị trí của mỗi nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

Dựa vào điện tích hạt nhân nguyên tử, người ta đã giải quyết được một vấn đề hết sức quan trọng : xác định số nguyên tố chưa tìm ra.

Cơ sở của định luật tuần hoàn không phải là khối lượng nguyên tử (nhìn chung giá trị này tăng khi chuyển từ nguyên tố nọ đến nguyên tố kia nhưng khối lượng nguyên tử không tăng theo những đại lượng bằng nhau) mà cơ sở đó chính là giá trị của điện tích hạt nhân. Các giá trị này biến đổi đúng một đơn vị khi chuyển từ nguyên tố nọ đến nguyên tố kia.

Giữa hiđro và uran

Bây giờ có thể khẳng định rằng từ nguyên tố hiđro (Z = 1) đến nguyên tố uran(1) (Z = 92) phải chứa 92 nguyên tố. Như vậy, các nhà bác học thời ấy đã có thể khẳng định những nguyên tố nào còn chưa tìm thấy. Đó là các nguyên tố 43, 61, 72, 75, 85, 87, 91.

Dĩ nhiên là sau nguyên tố uran còn có các nguyên tố khác mà sau này mới tổng hợp được bằng con đường nhân tạo.

Giữa hiđro và heli

Trước đây, dựa vào hình thức của hệ thống tuần hoàn, người ta đã giả thiết sai lầm rằng giữa hiđro và heli phải có nguyên tố "halogen nhẹ" có khối lượng nguyên tử là 3 để chu kì 1 vừa có kim loại (hiđro) vừa có phi kim ("halogen nhẹ") rồi mới kết thúc bằng khí trơ heli (tương tự như các chu kì khác).

Giữa bari và tantan

Trước đây, số lượng và vị trí các nguyên tố trong khoảng giữa bari và tantan còn rất lộn xộn. Khi đã xác định được bari có Z = 56 và tantan có Z = 73 thì có thể khẳng định được rằng giữa hai nguyên tố đó có 16 nguyên tố khác và trật tự sắp xếp chúng là hoàn toàn xác định.

Khi xác định rằng tính chất của các nguyên tố biến đổi tuần hoàn theo chiều tăng của điện tích hạt nhân cũng chưa phải là đã khám phá ra căn nguyên của hiện tượng tuần hoàn. Vì điện tích hạt nhân cũng như số thứ tự của nguyên tố và khối lượng nguyên tử đều biến đổi theo đường thẳng từ nguyên tố đầu đến nguyên tố cuối trong hệ thống tuần hoàn.

(1) Các nguyên tố đứng sau uran (gọi là các nguyên tố siêu uran) không tồn tại trong tự nhiên và sau này mới điều chế nhân tạo được.

Biết được tổng số electron trong một nguyên tử là rất quan trọng nhưng chưa đủ. Tính chất hoá học và một số lớn tính chất vật lí của nguyên tố chủ yếu phụ thuộc vào cấu tạo lớp vỏ electron của nguyên tử.

Cho nên, chỉ có thể giải thích được sự biến đổi tính chất của các nguyên tố khi biết cấu trúc lớp vỏ electron trong nguyên tử các nguyên tố.

3. CẤU TRÚC LỚP VỎ ELECTRON CỦA NGUYÊN TỬ

Ngày nay, toàn bộ lí thuyết cấu tạo nguyên tử, cấu tạo phân tử đều dựa vào cơ học lượng tử.

Cơ học lượng tử là dạng hiện đại của vật lí lí thuyết nghiên cứu những hệ tiểu phân có kích thước cỡ electron, nguyên tử, phân tử. Nói khác đi, đó là vật lí học của những vật thể vi mô, còn vật lí học cổ điển là vật lí học của những vật thể vĩ mô ta gặp hằng ngày.

Cơ sở của cơ học lượng tử là phương trình Schrodinger (Srôđingơ) (đã nêu trong mục 1.4).

Việc giải phương trình Schrodinger cực kì khó khăn và phức tạp, ta chỉ cần biết rằng :

Việc giải phương trình Schrodinger đối với một nguyên tử cho phép xác định được hàm sóng ψ. Bình phương của các hàm sóng ψ (ψ^2) cho biết xác suất có mặt của electron tại một vị trí trong nguyên tử.

Mỗi nghiệm của phương trình (tức là mỗi trạng thái của electron trong nguyên tử) đều ứng với một hàm sóng ψ xác định gọi là *obitan nguyên tử* (thường gọi tắt là obitan).

Để dễ hình dung, người ta thường định nghĩa một cách gần đúng : obitan là một khu vực không gian quanh hạt nhân, trong đó xác suất tìm thấy electron (hay còn gọi là mật độ đám mây electron) là lớn nhất (≈ 90%). Những trạng thái khác nhau của electron ứng với những obitan khác nhau.

3.1. Các số lượng tử và obitan nguyên tử

Một obitan nguyên tử được đặc trưng bằng 3 số lượng tử n, m, l [$\psi_{n,l,m}$]. Ba số lượng tử này xuất hiện một cách tự nhiên khi giải phương trình Schrodinger. Số lượng tử thứ nhất *n* có liên quan tới kích thước và năng lượng của obitan, số lượng tử thứ hai *l* có liên quan tới hình dạng obitan và số lượng tử thứ ba *m* liên quan tới sự định hướng của obitan trong không gian quanh hạt nhân.

Đó là những số nguyên thể hiện tính biến đổi không liên tục, từng lượng nhất định (mà nhỏ nhất là lượng tử) của các thuộc tính của thế giới vi mô.

3.1.1. Các số lượng tử

a) ***Số lượng tử chính n*** có vai trò quan trọng nhất.

• Nó có thể nhận những giá trị nguyên dương bất kì từ 1 trở đi (n =1, 2, 3, 4, ...).

• Nó cho biết electron thuộc *lớp* nào trong nguyên tử và được kí hiệu như sau :

n =	1	2	3	4	5	...
lớp :	K	L	M	N	O	...

Số lượng tử chính xác định *năng lượng trung bình* của electron trên lớp thứ n

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2}R$$

Trong đó Z là điện tích hạt nhân, R là một hằng số gọi là hằng số Rydberg (Ritbe).

$$R = 1,097\times10^7\ m^{-1}.$$

• Nó cũng cho biết *kích thước obitan* (khoảng cách trung bình giữa electron và hạt nhân nguyên tử). Khi n tăng, khoảng cách đó cũng tăng.

Trong phương trình trên (phương trình xác định E_n), dấu (–) bên vế phải có ý nghĩa như sau: khi hạt nhân nguyên tử và electron ở cách xa nhau một khoảng vô cùng lớn ($n = \infty$) thì năng lượng tương tác E = 0; khi electron bị hạt nhân hút lại gần thì năng lượng của hệ giảm từ 0 đến giá trị E < 0. Vậy dấu (–) thể hiện tương tác hút giữa hạt nhân nguyên tử và electron.

Giá trị của n càng nhỏ (electron càng gần hạt nhân) thì electron liên kết với hạt nhân càng chặt chẽ: ta nói rằng electron ở mức năng lượng thấp. Càng xa hạt nhân (giá trị của n càng lớn), electron liên kết với hạt nhân càng kém chặt chẽ: ta nói rằng electron ở mức năng lượng cao hơn. Hệ bền nhất khi năng lượng E_n thấp nhất.

b) ***Số lượng tử phụ l*** (còn gọi là *số lượng tử obitan*)

Cùng với số lượng tử chính *n*, số lượng tử phụ *l* xác định *năng lượng của electron.*

Đối với mỗi giá trị của *n*, số lượng tử phụ *l* có thể nhận những giá trị nguyên dương bất kì trong giới hạn từ 0 đến (n – 1).

Như vậy, nếu n = 1 thì *l* = 0.

nếu n = 2 thì *l* = 0 hoặc bằng 1...

Chú ý rằng số giá trị có thể có của *l* bằng giá trị của n. Chẳng hạn, nếu n = 2 thì *l* chỉ có thể có 2 giá trị (bằng 0 và bằng 1)...

Các trị số của *l* được kí hiệu như sau:

l =	0	1	2	3	4
Kí hiệu[1] :	s	p	d	f	g...

(1) Những kí hiệu s, p, d, f... xuất hiện trong lịch sử nghiên cứu quang phổ nguyên tử và là chữ đầu của các từ "sharp" (vạch sắc); "principal" (vạch chính); "diffuse" (vạch nhoè); "fundamental" (vạch cơ bản). Thật ra việc lựa chọn từ ở đây không có ý nghĩa vật lí.

Các electron có cùng trị số n và l hợp thành một *phân lớp* (phân mức) ứng với :

$n = 1$ và $l = 0 \Rightarrow$ phân lớp 1s ; $n = 2$ và $l = 0 \Rightarrow$ phân lớp 2s ; $n = 3$ và $l = 0 \Rightarrow$ phân lớp 3s.

Số lượng tử phụ l xác định hình dạng của obitan và mỗi giá trị của l ứng với một dạng obitan khác nhau.

$l = 0 \Rightarrow$ ứng với obitan s, có dạng hình cầu.

$l = 1 \Rightarrow$ ứng với obitan p, có dạng số 8 nổi v.v...

(sẽ nói kĩ hơn ở phần dưới)

c) *Số lượng tử từ m_l* (đôi khi còn gọi là số lượng tử định hướng obitan)

Số lượng tử từ m_l quy định sự định hướng của obitan trong không gian quanh hạt nhân.

Đối với mỗi giá trị của l, số lượng tử từ m_l có thể nhận $(2l + 1)$ giá trị, kể cả giá trị 0. Chẳng hạn:

$l = 0$ m có 1 giá trị bằng 0.

$l = 1$ m có thể nhận 3 giá trị là −1, 0, +1.

$l = 2$ m có thể nhận 5 giá trị là −2, −1, 0, +1, +2.

Mỗi giá trị của m ứng với một obitan.

Bảng dưới đây khái quát mối quan hệ giữa ba số lượng tử n, l, m_l.

Bảng 2.2. Quan hệ giữa các số lượng tử đối với các obitan nguyên tử

Tên, kí hiệu (có liên hệ với)	*Các giá trị được phép*	*Số lượng tử*		
chính n (năng lượng kích thước)	Số nguyên dương (1, 2, 3...)	1	2	3
phụ, l (hình dạng)	0 đến n−1	0	0 1	0 1 2
từ, m_l (định hướng)	$-l$, ... 0..., $+l$	0	0 −1 0 +1	0 −1 0 +1 −2 −1 0 +1 +2

d) *Số lượng tử từ spin (m_s)*

Ba số lượng tử vừa nêu trên đặc trưng cho sự chuyển động của electron xung quanh hạt nhân nguyên tử; chúng cho phép ta xác định obitan của một electron.

Tuy nhiên, electron còn có chuyển động riêng, nó có momen động lượng riêng do sự "tự quay" quanh một trục tưởng tượng của nó gây ra. Vectơ mô tả sự quay đó chỉ có thể định hướng theo hai chiều và mỗi chiều đó ứng với số lượng tử từ spin $m_s = +\frac{1}{2}$ hoặc $m_s = -\frac{1}{2}$.

Spin không phải là một tính chất của obitan.

Tóm lại, trạng thái đầy đủ của electron trong nguyên tử được đặc trưng bằng bốn số lượng tử: n, *l*, m_l và m_s.

3.1.2. Cách biểu diễn obitan nguyên tử

Hóa học của các nguyên tố và các hợp chất của chúng chẳng những được xác định bởi các electron trong nguyên tử của nguyên tố đó mà còn liên quan đến hình dạng của các obitan mà các electron "chiếm cư". Vì vậy, ta cần xem xét cách biểu diễn hình dạng các obitan nguyên tử.

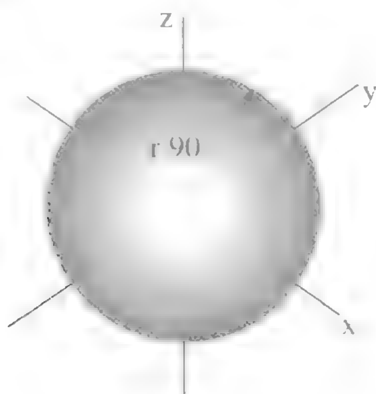
a) *Obitan s*

Một obitan với *l* = 0 có *dạng hình cầu* mà hạt nhân ở tâm gọi là *obitan s.*

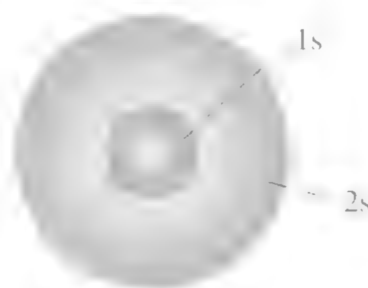
Chẳng hạn, nguyên tử hiđro, ở trạng thái cơ bản có electron trong obitan 1s.

Việc nghiên cứu lí thuyết và thực nghiệm cho biết: tất cả các *obitan s* đều có *dạng hình cầu*. Điều khác nhau là ở chỗ khi giá trị n tăng lên thì kích thước obitan cũng tăng.

Như vậy, mật độ electron trong obitan 1s dày đặc hơn obitan 2s, và 2s dày đặc hơn 3s v.v...



Hình 2.13. Obitan s



Hình 2.14. Obitan 1s và 2s.

r là bán kính khối cầu, trong đó xác suất tìm thấy electron là 90%.

b) *Obitan p*

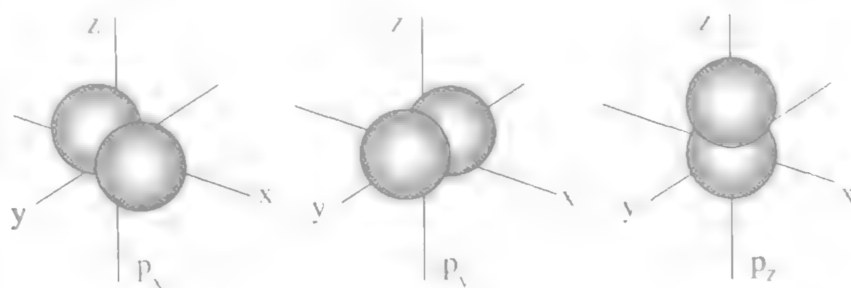
Một obitan với *l* = 1 có dạng số 8 nổi, với hai miền có xác suất lớn ở hai bên hạt nhân gọi là obitan p.

Vì giá trị lớn nhất của *l* = n − 1 cho nên chỉ có mức năng lượng với n = 2 hoặc lớn hơn mới có obitan p.

Như vậy, năng lượng thấp nhất của obitan p là 2p.

Cũng như đối với obitan s, obitan 3p lớn hơn obitan 2p, 4p lớn hơn 3p,...

Với giá trị l = 1, có thể có ba giá trị của m_l là –1, 0, +1 tương ứng với 3 obitan p *thẳng góc với nhau*. Chúng có kích thước, hình dạng năng lượng như nhau, chỉ khác ở sự định hướng. Để thuận tiện, ta gán cho các obitan p các trục x, y, z; obitan p_x nằm dọc trục x; p_y dọc trục y; p_z dọc theo trục z.



Hình 2.15. Obitan p_x, p_y, p_z

c) *Obitan d*

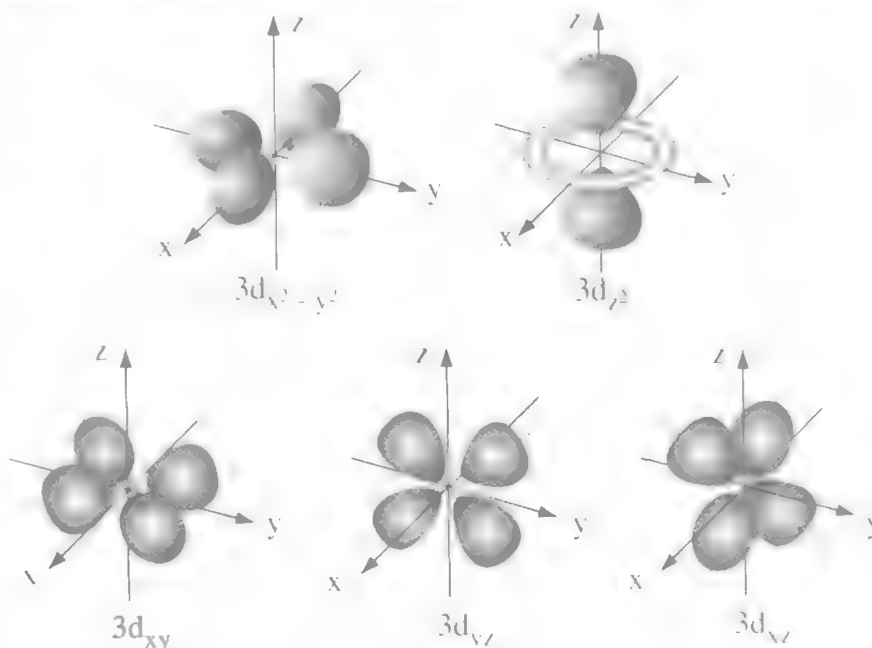
Một obitan với l = 2 gọi là *obitan d.*

Với l = 2, m_l có thể có năm giá trị là –2, –1, 0, +1, +2. Như vậy, obitan d có thể có một trong 5 định hướng khác nhau.

Cần chú ý rằng, obitan d (l = 2) phải có số lượng tử n = 3 hoặc lớn hơn.

Các obitan 4d mở rộng ra xa hạt nhân hơn là các obitan 3d và các obitan 5d còn xa hơn.

5 obitan d được biểu diễn theo hình vẽ dưới đây.



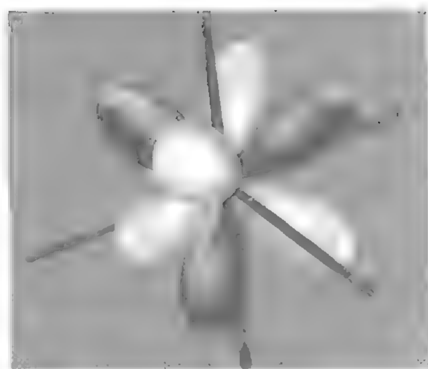
Hình 2.16. 5 obitan d

d) *Các obitan với giá trị l cao hơn*

– Các obitan với l = 3 là *các obitan f* và phải có số lượng tử chính n thấp nhất là n = 4. Có 7 obitan f (2l + 1 = 7), mỗi obitan f có hình dạng rất phức tạp.

Hình dưới đây biểu diễn một trong số 7 obitan 4f có thể có.

– Các obitan với $l = 4$ là *các obitan g*, ta không đề cập ở đây vì ta chưa biết chúng có vai trò gì đối với liên kết hoá học.



Hình 2.17. Một trong 7 obitan f

3.2. Sự sắp xếp các electron trong nguyên tử

Dựa vào những dữ liệu quang phổ và dựa vào tổ hợp 4 số lượng tử đặc trưng cho trạng thái của mỗi electron, người ta đã thiết lập được sự phân bố electron trong nguyên tử thành *lớp* và *phân lớp*.

Nhưng ta chưa xác định được số electron có thể có ở mỗi lớp, mỗi phân lớp, mỗi obitan là bao nhiêu và cách sắp xếp chúng trong nguyên tử như thế nào?

Nhờ áp dụng nguyên lí Pauli, nguyên lí vững bền và quy tắc Hund, ta có thể giải quyết được những vấn đề trên.

Sau đây ta lần lượt xét các nguyên lí và quy tắc đó.

3.2.1. Nguyên lí Pauli

Theo nguyên lí Pauli thì:

Trong một nguyên tử, không thể có hai electron đặc trưng bằng 4 số lượng tử hoàn toàn giống nhau[1].

Từ nguyên lí trên, có thể rút ra các kết quả sau:

a) ***Số electron tối đa trong một obitan*** (còn gọi là ô lượng tử)

Ở mỗi obitan, các electron đã được đặc trưng bằng ba số lượng tử n, l, m giống nhau thì số lượng tử thứ tư là m_s phải khác nhau.

Như vậy, *mỗi obitan chỉ có thể chứa tối đa là hai electron có spin ngược dấu*.

Giả sử, mỗi obitan có 3 electron thì ít ra cũng có 2 electron có spin trùng nhau. Như vậy, sẽ có hai electron có bốn số lượng tử giống nhau, điều đó trái với nguyên lí Pauli.

Chẳng hạn, ta xét obitan 1s của nguyên tử hiđro.

Obitan này được quy định bởi 3 số lượng tử tương ứng với các giá trị $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$. Mỗi obitan được tượng trưng bằng một ô vuông (gọi là ô lượng tử) và mỗi electron trong obitan được tượng trưng bằng một mũi tên hướng lên trên hay xuống dưới ứng với $m_s = +\frac{1}{2}$ hay $m_s = -\frac{1}{2}$.

---

(1) Một cách phát biểu khác của nguyên lí Pauli: Trong nguyên tử không có và không thể có hai electron giống hệt nhau.

Như vậy, electron trong obitan 1s của nguyên tử hiđro được đặc trưng bằng 4 số lượng tử n = 1, l = 0, m_l = 0, $m_s = +\frac{1}{2}$ hoặc n = 1, l = 0, m_l = 0, $m_s = -\frac{1}{2}$ và được kí hiệu là [↑] hoặc [↓].

Nguyên tử heli có 2 electron. Cả hai electron đều chiếm obitan 1s. Theo nguyên lí Pauli, hai electron này phải có spin ngược dấu và được kí hiệu như sau: [↑↓].

b) *Số electron tối đa trong một phân lớp*

Mỗi phân lớp (với các giá trị n, l giống nhau) có tối đa (2l + 1) obitan ứng với (2l + 1) trị số của m.

Vì mỗi obitan chứa tối đa 2 electron nên *mỗi phân lớp chứa tối đa (2l + 1) electron*. Cụ thể là:

– Phân lớp s (l = 0) chỉ có 1obitan, vậy *phân lớp s chứa tối đa 2 electron.*

– Phân lớp p (l = 1) có 3 obitan, vậy *phân lớp p chứa tối đa 6 electron.*

– Phân lớp d (l = 2) có 5 obitan, vậy *phân lớp d chứa tối đa 10 electron.*

– Phân lớp f (l = 3) có 7 obitan, vậy *phân lớp f chứa tối đa 14 electron.*

c) *Số electron tối đa trong một lớp*

Mỗi electron có n phân lớp ứng với các giá trị của l từ 0 đến (n –1); mỗi phân lớp chứa tối đa là 2(2l + 1) electron. Vậy, số electron tối đa trong một lớp là:

$$S_n = \sum_{l=0}^{l=(n-1)} 2(2l+1) = 2[1+3+5+7+...+(2n-1)] = 2n^2$$

$$S_n = 2n^2.$$

Như vậy là: *lớp thứ n chứa tối đa $2n^2$ electron.* Cụ thể là:

Lớp K (n = 1) chứa tối đa $2 \times 1^2 = 2$ electron.

Lớp L (n = 2) chứa tối đa $2 \times 2^2 = 8$ electron.

Lớp M (n = 3) chứa tối đa $2 \times 3^2 = 18$ electron.

Lớp N (n = 4) chứa tối đa $2 \times 4^2 = 32$ eletron.

Lớp O (n = 5) chứa tối đa $2 \times 5^2 = 50$ electron.

Cần chú ý: Có thể xét số electron tối đa trong một lớp như sau:

– Lớp thứ nhất (lớp K) chỉ có phân lớp s: chứa tối đa 2 electron.

– Lớp thứ hai (lớp L) có hai phân lớp: phân lớp s (chứa tối đa 2 electron), phân lớp p (tối đa 6 electron), tổng cộng chứa tối đa 8 electron.

– Lớp thứ ba (lớp M) có 3 phân lớp: s, p, d nên chứa tối đa 18 electron.

– Lớp thứ tư (lớp N) có 4 phân lớp: s, p, d, f nên chứa tối đa 32 electron.

Tổng quát lại thì lớp thứ n chứa tối đa $2n^2$ electron.

Như vậy, *nguyên lí Pauli giới hạn số electron tối đa chứa trong một obitan, một phân lớp, một lớp.*

Nếu một lớp hoặc một phân lớp có số electron tối đa, người ta nói phân lớp hay lớp đó đã bão hoà.

Bảng sau đây ghi tóm tắt số electron tối đa có thể có ở mỗi phân lớp và mỗi lớp.

Bảng 2.3. Số electron tối đa trong các phân lớp và các lớp

Tên lớp	Phân lớp	Số obitan	Số electron tối đa trong mỗi phân lớp	Số electron tối đa trong mỗi lớp
n = 1	s	1	2	2
n = 2	s p	1 3	2 6	8
n = 3	s p d	1 3 5	2 6 10	18
n = 4	s p d f	1 3 5 7	2 6 10 14	32

3.2.2. Nguyên lí vững bền

Theo nguyên lí vững bền thì trong *nguyên tử các electron sẽ lần lượt chiếm các obitan có năng lượng từ thấp đến cao.*

Những mức năng lượng thấp nhất cũng là những mức năng lượng bền nhất; năng lượng của obitan càng nhỏ, sự bền vững càng lớn và electron sẽ chiếm các obitan này trước rồi lần lượt mới chiếm những obitan kém bền vững hơn.

Thứ tự năng lượng của obitan

Trong nguyên tử ở trạng thái cơ bản (không bị kích thích) nếu xếp các mức năng lượng theo thứ tự tăng dần thì thấy: nói chung năng lượng của các obitan thuộc lớp bên ngoài cao hơn năng lượng của obitan thuộc lớp bên trong, nhưng không hoàn toàn theo thứ tự lần lượt từ lớp K đến lớp L, M, N, v.v... nghĩa là không hoàn toàn theo trình tự hết các obitan lớp này rồi mới tiếp sang obitan của lớp khác.



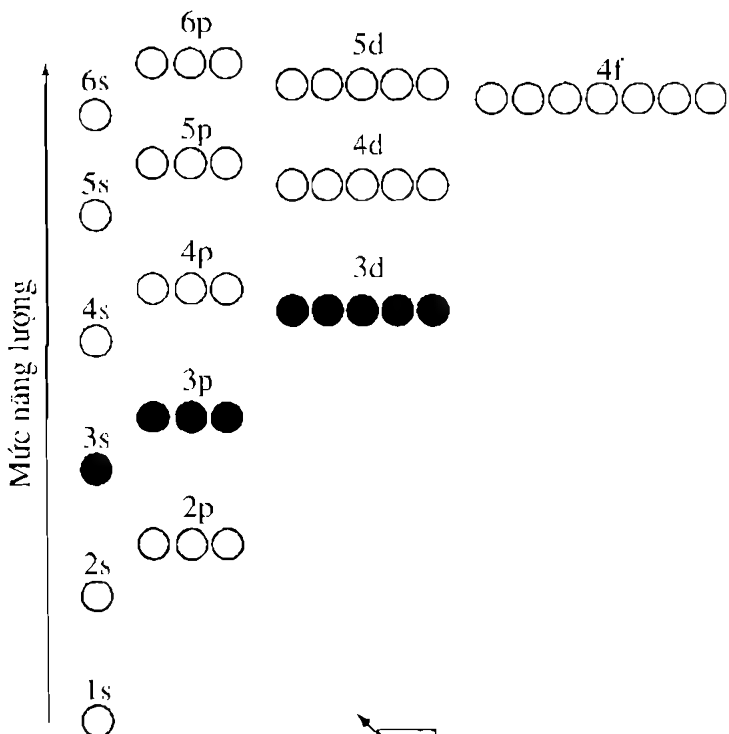
Hình 2.18. W.Pauli (1900 – 1958)

W.Pauli là nhà vật lí Thuỵ Sĩ gốc Áo. Ông có nhiều công trình lí thuyết trong lĩnh vực cấu tạo nguyên tử, trong đó nguyên lí Pauli được ông phát biểu năm 1925. Ông được tặng giải Nobel năm 1945.

Lí thuyết và thực nghiệm cho biết thứ tự tăng dần năng lượng của các obitan như sau:

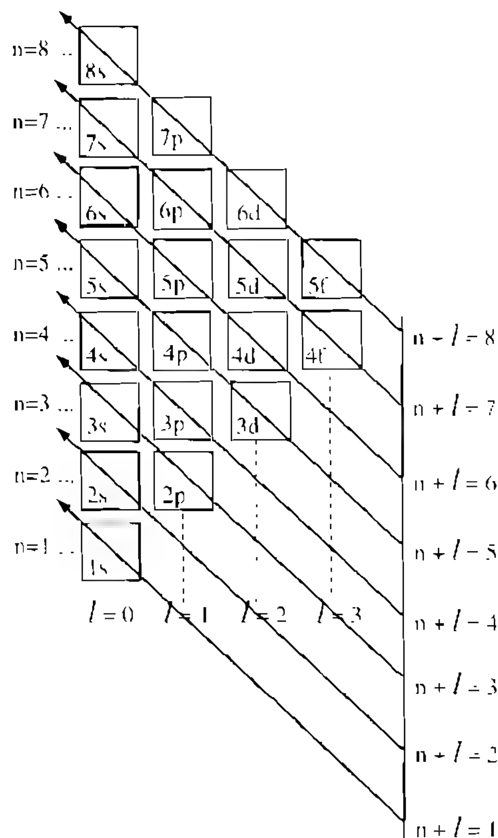
1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d ...

Như vậy, electron sẽ lần lượt chiếm các obitan theo thứ tự đó. Sơ đồ sau biểu diễn thứ tự mức năng lượng của các obitan trong nguyên tử.



Hình 2.19. Thứ tự mức năng lượng của các obitan trong nguyên tử

Hình dưới đây trình bày một cách đơn giản để nhớ thứ tự điền electron vào các obitan trong nguyên tử.



Hình 2.20. Một cách đơn giản để nhớ thứ tự điền electron vào các obitan trong nguyên tử

- Các obitan có cùng giá trị n được viết trên cùng một hàng ngang.

- Các obitan có cùng giá trị *l* được viết theo cùng một cột dọc.

- Thứ tự điền electron vào các obitan bắt đầu từ đáy tới đỉnh theo chiều mũi tên với giá trị (n+*l*) tăng dần.

(Như vậy, thứ tự điền e sẽ là :

1s → 2s → 2p → 3s → 3p → 4s → 3d ...)

Qua giản đồ năng lượng trên ta thấy, kể từ số lượng tử chính n > 3, các mức ns, (n−1)d, (n−2)f rất gần nhau và bao giờ cũng có năng lượng thấp hơn mức np

3.2.3. Quy tắc Cletcopski về trình tự phân bố các mức năng lượng trong nguyên tử

a) ***Khi điện tích hạt nhân tăng***, các electron chiếm các mức năng lượng có tổng số (n + *l*) nhỏ, rồi đến các mức năng lượng có tổng số (n + *l*) lớn dần.

b) ***Đối với các phân lớp*** có tổng số (n + *l*) bằng nhau thì electron được xếp vào phân lớp có trị số n nhỏ trước rồi mới tới phân lớp có n lớn sau. Chẳng hạn:

Phân lớp	4s	3d	4p
(n + *l*)	(4 + 0) = 4	(3 + 2) = 5	(4 + 1) = 5

Theo (a) thì electron chiếm mức 4s trước, chiếm mức 3d sau. Theo (b) thì electron chiếm mức 3d trước, chiếm mức 4p sau.

Trình tự điền các phân lớp electron trong nguyên tử được trình bày trong hình 2.20.

3.2.4. Sự sắp xếp electron trong nguyên tử

a) ***Cấu hình electron***

Cấu hình electron là cách biểu diễn sự phân bố electron theo các phân lớp và các lớp.

Người ta quy ước chỉ phân lớp electron bằng những chữ s, p, d, f của obitan và bằng những con số đặt trước những chữ này để chỉ số thứ tự của lớp electron. Số electron của obitan được viết cao bên phải kí hiệu của obitan (không có tính chất của số mũ).

Ví dụ, cấu hình electron của nguyên tử hiđro, của heli, của liti:

H: $1s^1$, trong đó 1 là số thứ tự của lớp (1); s là kí hiệu obitan (s); s^1 số electron trong obitan s (1).

He: $1s^2$

Li: $1s^22s^1$.

Để diễn tả một cách đầy đủ hơn, người ta dùng những ô lượng tử. Cách này cho biết trạng thái những electron độc thân và những electron đã ghép đôi trong nguyên tử.

b) ***Sự sắp xếp electron trong nguyên tử. Quy tắc Hund***

Cấu hình electron

Z = 1	Nguyên tử hiđro :	H $1s^1$ hay [↑]
Z = 2	Nguyên tử heli:	He $1s^2$ hay [↓↑]

Z = 3 Nguyên tử liti: Li $1s^2 2s^1$ hay ↓↑ | ↑

Z = 4 Nguyên tử beri : Be $1s^2 2s^2$ hay ↓↑ | ↓↑ (1s, 2s)

Z = 5 Nguyên tử bo : B $1s^2 2s^2 2p^1$ hay ↓↑ | ↓↑ | ↑ | | (1s, 2s, 2p)

Z = 6 Nguyên tử cacbon : C $1s^2 2s^2 2p^2$.

Nguyên tử cacbon có 6 electron. Sự sắp xếp 5 electron đầu diễn ra như trên, đến electron thứ 6 sẽ được phân bố vào obitan 2p đã chứa 1 electron hay phân bố vào obitan 2p khác còn trống? (ta nhớ rằng 3 obitan p có cùng mức năng lượng, chỉ khác nhau về sự định hướng trong không gian).

(1) ↓↑ | ↓↑ | ↓↑ | | (1s, 2s, 2p)   (2) ↓↑ | ↓↑ | ↑ | ↑ | (1s, 2s, 2p)

Quy tắc Hund sẽ cho biết điều đó.

Quy tắc Hund

Trong cùng một phân lớp, các electron sẽ được phân bố vào các obitan như thế nào để tổng số spin của chúng là cực đại.

Đối với nguyên tử cacbon, nếu xếp theo cách (1), tổng số spin của electron 2p se bằng không ($-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}=0$); nếu xếp theo cách (2), tổng số spin của electron 2p sẽ bằng 1 ($+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}=1$).

Như vậy, cách sắp xếp thứ tự (2) phù hợp với quy tắc Hund và trong trường hợp đó, người ta gọi là 2e có spin song song với nhau.

Vì mỗi cặp electron có spin ngược dấu triệt tiêu nhau, nên theo quy tắc Hund, *nguyên tử có khuynh hướng có số electron độc thân tối đa.*

Z = 7 *Nguyên tử nitơ* N: $1s^2 2s^2 2p^3$ hay ↓↑ | ↓↑ | ↑ | ↑ | ↑ (1s, 2s, 2p)

Từ quy tắc Hund dẫn đến kết quả sau:

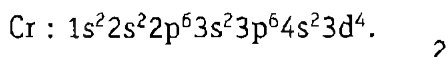
Độ bền của các *cấu hình electron* chẳng những thể hiện ở các lớp electron bão hoà [2–8 –18– 32] và các phân lớp bão hoà [s^2, p^6, d^{10}, f^{14}] mà *còn thể hiện ở cả cấu hình các phân lớp nửa bão hoà* p^3, d^5, f^7.

Do đó, có thể giải thích được một số trường hợp "bất thường" khi xây dựng lớp vỏ electron của một số nguyên tố như Cr, Cu, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, Au...

– Một số trường hợp "bất thường" khi xây dựng các lớp electron:

+ Ví dụ: trường hợp của crom

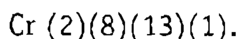
Nếu theo trình tự sắp xếp các mức năng lượng thì công thức electron của crom có thể viết như sau:



$$Cr: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4.$$

Và như vậy, các electron trong nguyên tử crom sẽ là Cr 2 / 12 / 8 / 2

Nhưng những dữ kiện về quang phổ cho biết rằng, ở nguyên tử crom chỉ có 1 electron ở lớp ngoài cùng và 13 electron ở lớp sát lớp ngoài cùng.



Cr (2)(8)(13)(1).

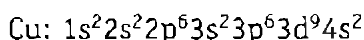
Sở dĩ như vậy vì phân lớp 4s có mức năng lượng xấp xỉ phân lớp 3d và cấu hình d^5 nửa bão hoà là cấu hình bền vững.

Ở đây, phân lớp 3d đã có 4 electron nên 1 electron của phân lớp 4s đã nhảy vào phân lớp 3d để đạt tới cấu hình $3d^5$ nửa bão hoà bền vững.

Vì vậy, cấu hình electron của nguyên tử crom sẽ là: Cr: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$.

+ Trường hợp của Cu và Pd:

Giả sử cấu hình electron của Cu là



$$Cu: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9 4s^2$$

thì phân lớp $3d^9$ chưa phải là cấu hình bền vững. Vì năng lượng của 3d xấp xỉ 4s, nên 1 electron của phân lớp 4s đã nhảy vào phân lớp 3d để đạt tới cấu hình $3d^{10}$ bền vững (bão hoà).

Còn đối với Pd thì cả 2 electron của phân lớp 5s nhảy vào phân lớp 4d đã có 8 electron để đạt tới cấu hình $4d^{10}$ bền vững. Vì vậy mà phân lớp 5s (và do đó cả lớp thứ 5) không có electron nào. Đấy là trường hợp duy nhất trong hệ thống tuần hoàn mà số lớp electron nhỏ hơn số chu kì.

Một số trường hợp khác cũng tương tự như Mo, Ag, Au...

Tuy nhiên lại có một số trường hợp, cấu hình electron của các phân lớp nửa bão hoà không thể hiện độ bền vững.

Chẳng hạn, nguyên tố vonfam (Z = 74) cùng ở nhóm VIB với nguyên tố crom (Z =24) nhưng cấu hình electron lại không tương tự nhau:

Cấu hình electron của nguyên tử Cr: $[Ar]3d^5 4s^1$.

Cấu hình electron của nguyên tử W: $[Kr][4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6]5d^4 6s^2$ (chứ không phải là $5d^5 6s^1$ tương tự Cr).

Làm thế nào để biết được điều đó?

Ngoài những nguyên lí và quy tắc nói trên, còn cần thêm những dữ kiện về số hạng quang phổ nguyên tử mới giúp ta viết đúng đắn cấu hình electron của nguyên tử các nguyên tố.

Bảng dưới đây cho biết cấu hình electron của nguyên tử các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

Bảng 2.4. Bảng cấu hình electron của các nguyên tố chu kì 1, 2, 3

Z	NGUYÊN TỐ	CẤU HÌNH ELECTRON	CẤU HÌNH ELECTRON VIẾT THEO SƠ ĐỒ OBITAN
1	H	$1s^1$	[↑]
2	He	$1s^2$	[↑↓]
3	Li	$1s^2 2s^1$	[↑↓] [↑]
4	Be	$1s^2 2s^2$	[↑↓] [↑↓]
1	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	[↑↓] [↑↓] [↑ | |]
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	[↑↓] [↑↓] [↑ | ↑ |]
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	[↑↓] [↑↓] [↑ | ↑ | ↑]
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑ | ↑]
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑]
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓]
11	Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓] [↑]
12	Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓] [↑↓]
13	Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓] [↑↓] [↑ | |]
14	Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓] [↑↓] [↑ | ↑ |]
15	P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓] [↑↓] [↑ | ↑ | ↑]
16	S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑ | ↑]
17	Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑]
18	Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	[↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓] [↑↓] [↑↓ | ↑↓ | ↑↓]

Bảng 2.5. Bảng cấu hình electron của các nguyên tố chu kì 4

Số hiệu nguyên tử	Nguyên tố	Sơ đồ obitan (4s, 3d, 4p)			Cấu hình electron đầy đủ	Cấu hình electron rút gọn
		4s	3d	4p		
19	K	[↑]	[ ][ ][ ][ ][ ]	[ ][ ][ ]	$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^1$	$[Ar]\ 4s^1$
20	Ca	[↑↓]	[ ][ ][ ][ ][ ]	[ ][ ][ ]	$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2$	$[Ar]\ 4s^2$
21	Sc	[↑↓]	[↑][ ][ ][ ][ ]	[ ][ ][ ]	$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^1$	$[Ar]\ 4s^2 3d^1$
22	Ti	[↑↓]	[↑][↑][ ][ ][ ]	[ ][ ][ ]	$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^2 3d^2$	$[Ar]\ 4s^2 3d^2$
23	V	[↑↓]	[↑][↑][↑][ ][ ]	[ ][ ][ ]	[illegible]	[illegible]
24	Cr	[↑]	[↑][↑][↑][↑][↑]	[ ][ ][ ]	$[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]\ 4s^1 3d^5$	$[Ar]\ 4s^1 3d^5$
25	Mn	[↑↓]	[↑][↑][↑][↑][↑]	[ ][ ][ ]	[illegible]	[illegible]
26	Fe	[↑↓]	[↑↓][↑][↑][↑][↑]	[ ][ ][ ]	[illegible]	[illegible]
27	Co	[↑↓]	[↑↓][↑↓][↑][↑][↑]	[ ][ ][ ]	[illegible]	[illegible]
28	Ni	[↑↓]	[↑↓][↑↓][↑↓][↑][↑]	[ ][ ][ ]	[illegible]	[illegible]
29	Cu	[↑]	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[ ][ ][ ]	[illegible]	[illegible]
30	Zn	[↑↓]	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[ ][ ][ ]	[illegible]	[illegible]
31	Ga	[↑↓]	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[↑][ ][ ]	[illegible]	[illegible]
32	Ge	[↑↓]	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[↑][↑][ ]	[illegible]	[illegible]
33	As	[↑↓]	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[↑][↑][↑]	[illegible]	[illegible]
34	Se	[↑↓]	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[↑↓][↑][↑]	[illegible]	[illegible]
35	Br	[↑↓]	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[↑↓][↑↓][↑]	[illegible]	[illegible]
36	Kr	[↑↓]	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[↑↓][↑↓][↑↓]	[illegible]	[illegible]

Bảng 2.6. Cấu hình electron của nguyên tử các nguyên tố hoá học

	H	He
1s	1	2

[He]	Li	Be
2s	1	2
2p		

[Ar]	Br
3d	10
4s	2
4p	5

Br : [Ar] $3d^{10}\ 4s^2\ 4p^5$

3A	4A	5A	6A	7A	8A
B	C	N	O	F	Ne
2	2	2	2	2	2
1	2	3	4	5	6

[Ne]	Na	Mg
3s	1	2
3p		

Al	Si	P	S	Cl	Ar
2	2	2	2	2	2
1	2	3	4	5	6

[Ar]	K	Ca
3d		
4s	1	2
4p		

3B	4B	5B	6B	7B	8B	8B	8B	1B	2B
Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
1	2	3	5	5	6	7	8	10	10
2	2	2	1	2	2	2	2	1	2

Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
10	10	10	10	10	10
2	2	2	2	2	2
1	2	3	4	5	6

[Kr]	Rb	Sr
4d		
5s	1	2
5p		

Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
1	2	4	5	5	7	8	10	10	10
2	2	1	1	2	1	1		1	2

In	Sn	Sb	Te	I	Xe
10	10	10	10	10	10
2	2	2	2	2	2
1	2	3	4	5	6

[Xe]	Cs	Ba	La
4f			
5d			1
6s	1	2	2
6p			

Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg
14	14	14	14	14	14	14	14	14
2	3	4	5	6	7	9	10	10
2	2	2	2	2	2	1	1	2

Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
14	14	14	14	14	14
10	10	10	10	10	10
2	2	2	2	2	2
1	2	3	4	5	6

	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
4f	1	3	4	5	6	7	7	9	10	11	12	13	14	14
5d	1						1							1

[Rn]	Fr	Ra	Ac
5f			
6d			1
7s	1	2	2

Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
	2	3	4	6	7	7	9	10	11	12	13	14	14
2	1	1	1			1							1
2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2

4. SỐ HẠNG QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ

4.1. Trạng thái của nguyên tử nhiều electron

Trạng thái năng lượng của nguyên tử nhiều electron chẳng những được xác định bởi những số lượng tử của các electron riêng biệt mà cả bởi sự tương tác của các momen obitan và momen spin của chúng trong không gian.

Ở các nguyên tố không nặng lắm, tương tác chủ yếu là :

– Tương tác giữa các momen obitan l_i của các electron sinh ra momen obitan tổng L của nguyên tử.

L được gọi là số lượng tử obitan của nguyên tử.

– Tương tác giữa các momen spin s_i với nhau sinh ra momen spin tổng S của nguyên tử.

S được gọi là số lượng tử spin của nguyên tử.

– Sau đó L và S tương tác với nhau sinh ra momen động lượng toàn phần J của nguyên tử.

J được gọi là số lượng tử nội của nguyên tố.

(*Cước chú*: Người ta dùng các chữ cái hoa để chỉ số lượng tử của nguyên tử; còn số lượng tử của từng electron riêng biệt được kí hiệu bằng chữ cái thường)

Trường hợp trình bày trên gọi là sơ đồ Russel – Sounders (Rớt-xen Xôn-đớc)

Ta xét sơ đồ Russel – Sounders một cách chi tiết hơn:

Đối với hệ gồm n electron (e) ta có:

$M_L = m_{l_1} + m_{l_2} + m_{l_3} + .. + m_{l_n}$ (trong đó M_L là số lượng tử từ của nguyen tử).

$M_S = m_{s_1} + m_{s_2} + m_{s_3} + .. + m_{s_n}$ (trong đó M_S là số lượng tử từ spin của nguyên tử).

Ngoài ra giữa L và M_L, S và M_S có hệ thức sau:

$$M_L = L, L - 1, L - 2, ..., -L$$

$$M_S = S, S - 1, S - 2, ..., -S.$$

Cước chú: s gọi là số lượng tử spin, còn m_s là số lượng tử từ spin của electron. Đối với một e, m_s chỉ có 2 trị số khác nhau:

$$s = \frac{1}{2}\ m_s = -\frac{1}{2} \text{ và } m_s = +\frac{1}{2}.$$

Khi nói e có spin bằng $+\frac{1}{2}$ hay $-\frac{1}{2}$ cần hiểu là nó có $m_s = +\frac{1}{2}$ hay $m_s = -\frac{1}{2}$ (số lượng tử từ spin m_s thường gọi tắt là spin).

4.2. Định nghĩa số hạng quang phổ nguyên tử

Cấu hình electron của nguyên tử mới chỉ xác định sự phân bố e theo n và l

(số lượng tử chính và số lượng tử obitan), do đó chưa xác định đầy đủ trạng thái của các e (muốn xác định đầy đủ cần có 4 số lượng tử n, l, m_l và m_s đối với mỗi electron).

Vì vậy, cùng một cấu hình e có thể có rất nhiều trạng thái khác nhau của các nguyên tử ứng với các giá trị khác nhau có thể có của m_l và m_s đối với mỗi e. Ví dụ cấu hình np^2 có 15 trạng thái khác nhau.

Khi *chưa tính đến tương tác đẩy giữa các electron* thì tất cả các trạng thái khác nhau của cùng một cấu hình electron của nguyên tử đều có ***cùng năng lượng.***

Khi *tính đến tương tác đẩy tĩnh điện giữa các* e thì những nhóm trạng thái này tách ra thành *những số hạng nguyên tử* (còn gọi là số hạng quang phổ) có năng lượng khác nhau; mỗi số hạng nguyên tử có L, S xác định và có năng lượng E_{LS} xác định.

Vậy số hạng quang phổ nguyên tử là một tập hợp trạng thái e *của nguyên tử, có cùng L và S và cùng năng lượng E_{LS} thuộc cùng một cấu hình* e *của nguyên tử* (tập hợp có thể chỉ có 1 trạng thái).

Cần chú ý phân biệt năng lượng của số hạng E_{LS} (tức năng lượng e của toàn nguyên tử với năng lượng của từng obitan riêng rẽ).

4.3. Kí hiệu của số hạng nguyên tử. Độ bội (g)

Số hạng nguyên tử được kí hiệu là:

^gL_J hay $^{2S+1}L_J$

a) Trạng thái có L =	0	1	2	3	4	5	6	7
được kí hiệu là:	S	P	D	F	G	H	I	K

(Cách kí hiệu đó lặp lại cách kí hiệu đã áp dụng cho các electron là: s, p, d, f, g, h...). Đừng nhầm kí hiệu S ứng với L = 0 với kí hiệu S dùng để chỉ số lượng tử spin của nguyên tử.

b) Chỉ số g = 2S + 1 ghi phía trên bên trái chữ L là *độ bội của số hạng*. Độ bội của quang phổ bằng số những vạch nhỏ trong một vạch kép thuộc một dãy xác định của quang phổ. Chính sự nghiên cứu quang phổ đã cho phép xác định những giá trị của L, S, (2S + 1) và J.

Sự *biết độ bội quang phổ của một nguyên tố* sẽ là một dữ kiện có ích *cho biết số electron độc thân trong nguyên tử.*

$$S = \sum s_i = N \times \frac{1}{2} \Rightarrow N = 2S$$

N là số electron độc thân.

Nếu những electron độc thân đều có cùng dấu thì số e đó bằng độ bội trừ đi 1 đơn vị.

Vậy số electron độc thân trong nguyên tử bằng độ bội giảm đi một đơn vị.

Những trạng thái của nguyên tử (hay phân tử) ứng với các trị số khác nhau của độ bội 2S + 1 được gọi như sau:

Bảng 2.7. Cách gọi các trạng thái của nguyên tử

S	2S + 1	Trạng thái
0	1	Đơn hay đơn tuyến
$\frac{1}{2}$	2	Đôi hay song tuyến
1	3	Bội ba hay tam tuyến
$\frac{3}{2}$	4	Bội bốn hay tứ tuyến
2	5	Bội năm hay ngũ tuyến.v.v...

c) Số lượng tử nội J được ghi phía dưới bên phải của chữ L. Ví dụ:

$^3P_0$ là số hạng có L = 1, S =1 và J = L – S = 0.

$^4S_{3/2}$ là số hạng có L = 0, S = $\frac{3}{2}$ và J = L + S = $\frac{3}{2}$.

(Ta sẽ nói về giá trị của J ngay phần dưới đây).

4.4. Cách tìm số hạng quang phổ nguyên tử của một cấu hình electron đã cho. Quy tắc Hund

Năm 1925, bằng thực nghiệm F. Hund đã tìm ra ba quy tắc cho phép xác định số hạng có năng lượng thấp nhất (gọi là *số hạng cơ bản*) của một cấu hình electron đã cho.

– **Quy tắc 1**: Số hạng có năng lượng thấp nhất là số hạng có spin tổng S lớn nhất, tức là độ bội 2S + 1 lớn nhất hay nói cách khác *có số electron độc thân có spin song song lớn nhất.*

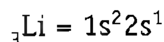
– **Quy tắc 2**: Với cùng trị số S, số hạng có năng lượng thấp nhất là số hạng có số lượng tử obitan tổng L lớn nhất.

– **Quy tắc 3**: Với cùng trị số L và S.

+ Nếu số electron *nhỏ hơn nửa bão hoà* thì số hạng có năng lượng thấp nhất ứng với số lượng tử nội J = L – S.

+ Nếu số electron *lớn hơn nửa bão hoà* thì số hạng có năng lượng thấp nhất ứng với số lượng tử nội J = L + S.

Ví dụ 1: Tìm số hạng quang phổ nguyên tử của liti:



$$_{3}Li = 1s^2 2s^1$$

ta làm như sau:

1) – Tìm các giá trị M_L có thể có, từ đó suy ra L.

Nguyên tử liti có 3 electron

$$M_L = m_{l_1} + m_{l_2} + m_{l_3} = 0$$

$$m_{l_1} = m_{l_2} = m_{l_3} = 0$$

$M_L = 0 \Rightarrow L = 0$ ứng với trạng thái S.

2) Tìm các giá trị M_S có thể có, từ đó suy ra S

$$M_S = m_{s_1} + m_{s_2} + m_{s_3}$$

$$m_{s_1} = +\frac{1}{2},\ m_{s_2} = -\frac{1}{2},\ m_{s_3} = \pm\frac{1}{2}$$

$$M_S = +\frac{1}{2} \text{ hay } -\frac{1}{2}.$$

$$S = \pm\frac{1}{2}.$$

3) Độ bội g =2S + 1 = 2

4) Số lượng tử nội $J = L + S = 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$

Số hạng quang phổ nguyên tử liti ở trạng thái cơ bản là $^2S_{1/2}$.

Cước chú: Từ đây trở xuống, ta chỉ xét trạng thái cơ bản.

Ví dụ 2: Tìm số hạng quang phổ nguyên tử của cacbon $C = 1s^2 2s^2 2p^2$.

Nguyên tử cacbon có 6 e.

Sự đóng góp của các electron trong các lớp và các phân lớp đã bão hoà vào các trị số L, S, J bao giờ cũng bằng không. Vì vậy ta chỉ cần chú ý tới các electron $2p^2$.

Ta vẽ 3 ô lượng tử tượng trưng cho 3 obitan 2p ứng với :

m_l =

1	0	−1

và xếp 2 e vào các obitan đó sao cho có nhiều electron độc thân nhất có spin song song và có $\sum m_l$ cực đại (quy tắc Hund (1)và (2)).

m_l =

1	0	−1
↑	↑	

do đó, $S = 1 \Rightarrow 2S + 1 = 3$

$$M_L = m_{l_1} + m_{l_2} = 0 + 1 = 1$$

$$L = M_L = 1 \rightarrow \text{trạng thái P}$$

Vì số electron nhỏ hơn nửa bão hoà nên $J_{min} = L - S$ (quy tắc Hund thứ 3)

$$J = 1 - 1 = 0$$

Vậy số hạng quang phổ nguyên tử cacbon ở trạng thái cơ bản là: $^3P_0$.

4.5. Số hạng quang phổ nguyên tử của 10 nguyên tố đầu hệ thống tuần hoàn. Định lí Pauli

a) *Hiđro* $H = 1s^1$

$$M_L = m_l = 0 \Rightarrow L = 0 \text{ trạng thái S}$$

$$M_S = m_s = +\frac{1}{2} \Rightarrow S = \frac{1}{2}.$$

$$\text{Độ bội } g = 2S + 1 = 2$$

$$J = L + S = \frac{1}{2}$$

Số hạng quang phổ nguyên tử H ở trạng thái cơ bản (viết tắt là (SHQPNT) (H)) là $^2S_{1/2}$

b) *Heli* $He = 1s^2$

$$M_L = m_{l_1} + m_{l_2} = 0 \Rightarrow L = 0 \text{ trạng thái S}$$

$$M_S = m_{s_1} + m_{s_2} = +\frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) = 0 \Rightarrow S = 0$$

$$g = 2S + 1 = 1$$

$$J = L + S = 0$$

Vậy (SHQPNT)(He) là $^1S_0$.

c) *Liti* $Li = 1s^22s^1$

Sự đóng góp của 2 e lớp 1s bên trong vào những số L, S, J bằng không như đã xét trong trường hợp của He. Electron $2s^1$ cho kết quả như electron 1s của hiđro.

Vậy, (SHQPNT)(Li) là $^2S_{1/2}$

d) *Beri* $Be = 1s^22s^2$

Ở đây cũng có thể coi như không có 2 electron $1s^2$. Sự xem xét 2 electron $2s^2$ cũng đưa tới kết quả như trường hợp của He.

Vậy, (SHQPNT)(Be) là $^1S_0$.

e) Bo $B = 1s^22s^22p^1$

Ở đây chỉ cần chú ý tới electron $2p^1$.

1	0	−1
↑		

m_l =

$$M_L = m_l = 1 \Rightarrow L = 1 \Rightarrow \text{trạng thái P.}$$

$$M_S = m_s = +\frac{1}{2} \Rightarrow S = \frac{1}{2}$$

$$\text{Độ bội } g = 2S + 1 = 2$$

$$J = L - S = \frac{1}{2}$$

Vậy, (SHQPNT)(B) là $^2P_{1/2}$.

f) *Cacbon* $C = 1s^2 2s^2 2p^2$

Đã xét ở ví dụ 2.

(SHQPNT)(C) là $^3P_0$.

g) *Nitơ* $N = 1s^2 2s^2 2p^3$

Chỉ cần chú ý tới 3 electron $2p^3$.

$$m_l = \begin{array}{|c|c|c|} \multicolumn{1}{c}{1} & \multicolumn{1}{c}{0} & \multicolumn{1}{c}{-1} \\ \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$$

$$M_L = m_{l_1} + m_{l_2} + m_{l_3} = 0 \Rightarrow L = 0 \text{ trạng thái S.}$$

$$M_S = m_{s_1} + m_{s_2} + m_{s_3} = \frac{3}{2} \Rightarrow M_S = \frac{3}{2} \Rightarrow S = \frac{3}{2}$$

$$g = 2S + 1 = 4$$

$$J = L + S = \frac{3}{2}.$$

Vậy, (SHQPNT)(N) là $^4S_{3/2}$.

h) *Oxi* $O = 1s^2 2s^2 2p^4$

Ở đây, có thể áp dụng một định lí của Pauli:

Trường hợp thiếu một số electron ở một trạng thái nào đó tương đương với trường hợp có đúng số electron ấy ở cùng trạng thái.

Ở đây trạng thái p thiếu 2 electron mới đầy đủ. Theo định lí Pauli thì trường hợp này tương đương với trường hợp nguyên tử cacbon có 2 electron ở trạng thái p ($1s^2 2s^2 2p^2$).

Vậy trạng thái của nguyên tử oxi cũng sẽ là ^3P.

Tuy nhiên vì số electron lớn hơn nửa bão hoà ($\begin{array}{|c|c|c|} \hline \downarrow\uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$) nên J = L + S

$$J = L + S = 1 + 1 = 2$$

Vậy, (SHQPNT)(O) là $^3P_2$.

i) *Flo* $F = 1s^2 2s^2 2p^5$

Trường hợp này tương đương với trường hợp của B ($1s^2 2s^2 2p^1$) do đó có trạng thái ^2P.

Tuy nhiên, vì số electron lớn hơn nửa bão hoà ($\begin{array}{|c|c|c|} \hline \downarrow\uparrow & \downarrow\uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$) nên

$$J = L + S = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

Vậy, (SHQPNT)(F) là $^3P_{3/2}$.

j) *Neon* Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$

Tất cả các obitan đều đầy đủ, mỗi ô lượng tử đều có 2 electron ghép đôi.

Vậy : L = 0, S = 0, do đó J = 0

(SHQPNT)(Ne) là $^1S_0$.

Những kết quả nói trên đối với 10 nguyên tố đầu trong hệ thống tuần hoàn sẽ lại được tìm thấy cho một số nguyên tố khác dưới đây.

Bảng 2.8. Số hạng quang phổ ở trạng thái cơ bản của các nguyên tố nhóm A

Nhóm	Nguyên tố	Trạng thái cơ bản
I	H. Kim loại kiềm (Na → Cs)	$^2S_{1/2}$
II	Be → Ba	$^1S_0$
III	B → Tl	$^2P_{1/2}$
IV	C → Pb	$^3P_0$
V	N → Bi	$^4S_{3/2}$
VI	O → Po	$^3P_2$
VII	F → I	$^2P_{3/2}$
VIII	He → Rn	$^1S_0$

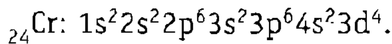
Bảng 2.9. Các trạng thái cơ bản đối với các electron tương đương s, p và d

Electron tương đương	Số hạng	Electron tương đương	Số hạng
s^1	^2S	d^1 hay d^9	^2D
s^2	^1S	d^2 hay d^8	^3F
p^1 hay p^5	^2P	d^3 hay d^7	^4F
p^2 hay p^4	^3P	d^4 hay d^6	^5D
p^3	^4S	d^5	^6S
p^6	^1S	d^{10}	^2S

Trong nhiều trường hợp các số hạng được xác định theo quang phổ nguyên tử và *từ số hạng quang phổ nguyên tử ta biết được cấu hình electron.*

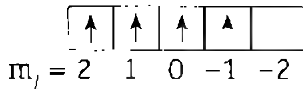
Ví dụ 1: Viết cấu hình electron của nguyên tử crom, biết số hạng quang phổ nguyên tử của nó ở trạng thái cơ bản là $^7S_3$.

a) Theo thứ tự các obitan có năng lượng từ thấp lên cao, ta lần lượt điền các electron:


$_{24}Cr$: $1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^4$.

Cấu hình electron này ứng với SHQPNT được xác định như sau:

Ở đây ta chỉ chú ý đến 4 electron thuộc obitan 3d



$$M_L = \Sigma m_l = 2 \Rightarrow L = 2 \Rightarrow \text{trạng thái D}$$

$$S = 2 \rightarrow 2S + 1 = 5$$

$$J = L - S = 0$$

Số hạng quang phổ nguyên tử ứng với cấu hình electron ta viết trên là $^5D_0$, không phù hợp với thực tế.

b) Đầu bài cho biết (SHQPNT)(Cr) là $^7S_3$. Như vậy, trong nguyên tử crom có:

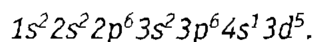
+ 6 electron độc thân (nhỏ hơn độ bội 1 đơn vị)

+ Nguyên tử ở trạng thai S vạy L = 0.

+ Số lượng tử spin tổng $S = 6 \times \frac{1}{2} = 3$.

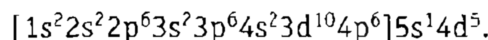
+ Số lượng tử nội J = L + S = 0 + 3 = 3.

Vậy cấu hình electron của nguyên tử crom phải là:


$$1s^22s^22p^63s^23p^64s^13d^5.$$

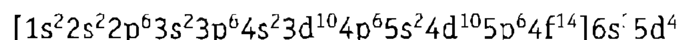
Ví dụ 2: Viết cấu hình electron của nguyên tử molipđen $_{42}Mo$, biết (SHQPNT) (Mo) là $^7S_3$.

Molipđen cùng thuộc nhóm VIB trong hệ thống tuần hoàn với crom, có cùng (SHQPNT) là $^7S_3$. Vậy, cấu hình electron của Mo tương tự Cr, cụ thể là


$$[1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^{10}4p^6]5s^14d^5.$$

Ví dụ 3: Viết cấu hình electron của nguyên tử vonfam ($_{74}W$) ứng với (SHQPNT) là $^5D_0$.

Vonfam cùng thuộc nhóm VIB như crom và molipđen nhưng cấu hình electron không tương tự hai nguyên tố trên mà tương tự trường hợp (a) trong ví dụ 1, cụ thể là:


$$[1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^{10}4p^65s^24d^{10}5p^64f^{14}]6s^2 5d^4$$

Qua các ví dụ trên ta thấy, dựa vào số hạng quang phổ nguyên tử, ta có thể viết đúng cấu hình electron của nguyên tử các nguyên tố có cấu hình electron phức tạp.

Bảng 2.10. Cấu hình electron và số hạng quang phổ nguyên tử ở trạng thái cơ bản

Số hiệu nguyên tử	Nguyên tố	Cấu hình electron	Số hạng quang phổ	Số hiệu nguyên tử	Nguyên tố	Cấu hình electron	Số hạng quang phổ
1	H	1s	$^2S_{1/2}$	27	Co	$3d^74s^2$	$^4F_{9/2}$
2	He	$1s^2$	$^1S_0$	28	Ni	$3d^84s^2$	$^3F_4$
3	Li	[He]2s	$^2S_{1/2}$	29	Cu	$3d^{10}4s$	$^2S_{1/2}$
4	Be	$2s^3$	$^1S_0$	30	Zn	$3d^{10}4s^2$	$^1S_0$
5	B	$2s^22p$	$^2P_{1/2}$	31	Ga	$3d^{10}4s^24p$	$^2P_{1/2}$
6	C	$2s^22p^2$	$^3P_0$	32	Ge	$3d^{10}4s^24p^2$	$^2P_0$
7	N	$2s^22p^3$	$^4S_{3/2}$	33	As	$3d^{10}4s^24p^3$	$^4S_{3/2}$
8	O	$2s^22p^4$	$^3P_2$	34	Se	$3d^{10}4s^24p^4$	$^2P_2$
9	F	$2s^22p^5$	$^2P_{3/2}$	35	Br	$3d^{10}4s^24p^6$	$^2P_{3/2}$
10	Ne	$2s^22p^6$	$^1S_0$	36	Kr	$3d^{10}4s^24p^6$	$^1S_0$
11	Na	[Ne]3s	$^2S_{1/2}$	37	Rb	[Kr]5s	$^3S_{3/2}$
12	Mg	$3s^2$	$^1S_0$	38	Sr	$5s^2$	$^1S_0$
13	Al	$3s^23p$	$^2P_{1/2}$	39	Y	$4d5s^2$	$^2D_{3/2}$
14	Si	$3s^23p^2$	$^3P_0$	40	Zr	$4d^25s^2$	$^3F_2$
15	P	$3s^23p^3$	$^4S_{3/2}$	41	Nb	$4d^45s$	$^6D_{1/2}$
16	S	$3s^23p^4$	$^3P_2$	42	Mo	$4d^55s$	$^7S_3$
17	Cl	$3s^23p^5$	$^2P_{3/2}$	43	Tc	$4d^55s^2$	$^6S_{5/2}$
18	Ar	$3s^23p^6$	$^1S_0$	44	Ru	$4d^75s$	$^5F_5$
19	K	[Ar]4s	$^2S_{1/2}$	45	Rh	$4d^85s$	$^4F_{9/2}$
20	Ca	$4s^2$	$^1S_0$	46	Pd	$4d^{10}$	$^1S_0$
21	Sc	$3d4s^2$	$^2D_{3/2}$	47	Ag	$4d^{10}5s$	$^2S_{1/2}$
22	Ti	$3d^24s^2$	$^3F_2$	48	Cd	$4d^{10}5s^2$	$^1S_0$
23	V	$3d^34s^2$	$^4F_{3/2}$	49	In	$4d^{10}5s^25p$	$^2P_{1/2}$
24	Cr	$3d^54s$	$^7S_3$	50	Sn	$4d^{10}5s^25p^2$	$^3P_0$
25	Mn	$3d^54s^2$	$^6S_{5/2}$	51	Sb	$4d^{10}5s^25p^3$	$^4S_{3/2}$
26	Fe	$3d^64s^2$	$^5D_4$	52	Te	$4d^{10}5s^25p^4$	$^3P_2$

53	I	$4d^{10}5s^25p^5$	$^2P_{3/2}$	79	Au	$6s$	$^2S_{1/2}$
54	Xe	$4d^{10}5s^25p^6$	$^1S_0$	80	Hg	$6s^2$	$^1S_0$
55	Cs	$[Xe]6s$	$^2S_{1/2}$	81	Tl	$6s^26p$	$^2P_{1/2}$
56	Ba	$6s^2$	$^1S_0$	82	Pb	$6s^26p^2$	$^3P_0$
57	La	$5d6s^2$	$^2D_{3/2}$	83	Bi	$6s^26p^3$	$^4S_{3/2}$
58	Ce	$4f^26s^2$	$^3H_4$	84	Po	$6s^26p^4$	$^3P_2$
59	Pr	$4f^36s^2$	$^4I_{9/2}$	85	At	$6s^26p^5$	$^2P_{3/2}$
60	Nd	$4f^46s^2$	$^5I_4$	86	Rn	$6s^26p^6$	$^1S_0$
61	Pm	$4f^56s^2$	$^6H_{5/2}$	87	Fr	$[Rn]7s$	$^2S_{1/2}$
62	Sm	$4f^66s^2$	$^7F_0$	88	Ra	$7s^2$	$^1S_0$
63	Eu	$4f^76s^2$	$^8S_{7/2}$	89	Ac	$[Rn]6d7s^2$	$^2D_{3/2}$
64	Gd	$4f^75d6s^2$	$^9D_2$	90	Th	$6d^27s^2$	$^3F_2$
65	Tb	$4f^96s^2$	$^6H_{15/2}$	91	Pa	$5f^26d7s^2$	$^4K_{11/2}$
66	Dy	$4f^{10}6s^2$	$^5I_8$	92	U	$5f^36d7s^2$	$^5L_6$
67	Ho	$4f^{11}6s^2$	$^4I_{15/2}$	93	Np	$5f^57s^2$	$^6H_{5/2}$
68	Er	$4f^{12}6s^2$	$^3H_6$	94	Pu	$5f^67s^2$	$^7F_0$
69	Tm	$4f^{13}6s^2$	$^2F_{7/2}$	95	Am	$5f^77s^2$	$^8S_{7/2}$
70	Yb	$4f^{14}6s^2$	$^1S_0$	96	Cm	$5f^76d7s^2$	$^9D_2$
71	Lu	$4f^{14}5d6s^2$	$^2D_{3/2}$	97	Bk	$5f^86d7s^2$ hoặc $5f^97s^2$	$^9H_{17/2}$
72	Hf	$4f^{14}5d^26s^2$	$^3F_2$				
73	Ta	$4f^{14}5d^36s^2$	$^4F_{3/2}$	98	Cf	$5f^{10}7s^2$	$^5I_8$
74	W	$4f^{14}5d^46s^2$	$^5D_0$	99	Es	$5f^{11}7s^2$	$^4I_{15/2}$
75	Re	$4f^{14}5d^56s^2$	$^6S_{5/2}$	100	Fm	$5f^{12}7s^2$	$^3H_6$
76	Os	$4f^{14}5d^66s^2$	$^5D_4$	101	Md	$5f^{13}7s^2$	$^2F_{7/2}$
77	Ir	$4f^{14}5d^76s^2$	$^4F_{9/2}$	102	No	$5f^{14}7s^2$	$^1S_0$
78	Pt	$4f^{14}5d^96s$	$^3D_3$	103	Lr	$5f^{14}6d7s^2$	$^2D_{5/2}$

5. ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN DƯỚI ÁNH SÁNG CỦA LÍ THUYẾT CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

Đóng góp cơ bản nhất của lí thuyết cấu tạo nguyên tử đối với định luật tuần hoàn là đã khám phá ra *nguyên nhân của sự biến đổi tuần hoàn* mà người có công đầu là nhà bác học người Đan Mạch Niels Bohr.

Khi sắp xếp các nguyên tố theo thứ tự điện tích hạt nhân tăng dần từ 1 đến 110, quá trình xây dựng các lớp vỏ electron trong nguyên tử các nguyên tố được lặp đi lặp lại một cách tuần hoàn; các cấu trúc electron của nguyên tử được phát triển tuần tự và sau mỗi chu kì, các nguyên tố lại có cấu hình electron tương tự nhau.

Quá trình xây dựng lớp electron bên ngoài cùng được lặp đi lặp lại. Như ta đã biết, sự biến đổi tính chất hoá học của các nguyên tố là do sự biến đổi cấu trúc của các lớp electron bên ngoài quyết định.

Như vậy, *sự biến đổi tuần hoàn tính chất của các nguyên tố là do sự lặp lại tuần hoàn những cấu hình electron giống nhau trong nguyên tử của các nguyên tố đó.*

5.1. Nguyên tắc xây dựng hệ thống tuần hoàn

Cấu trúc lớp vỏ electron của nguyên tử các nguyên tố là cơ sở để xây dựng hệ thống tuần hoàn.

Hệ thống tuần hoàn được xây dựng theo các nguyên tắc sau:

– Các nguyên tố được xếp theo chiều tăng dần của điện tích hạt nhân.

– Các nguyên tố *có cùng số lớp electron*[1] trong nguyên tử được xếp thành một hàng. Mỗi hàng được gọi là một *chu kì*.

– Các nguyên tố *có số electron ngoài cùng bằng nhau* được xếp thành một cột.

+ Mỗi cột là một nhóm (trong bảng tuần hoàn dạng dài có 18 nhóm).

+ Mỗi cột là một phân nhóm (trong bảng tuần hoàn dạng ngắn có 8 nhóm).

5.2. Cấu trúc của hệ thống tuần hoàn

Hiện nay có nhiều kiểu hệ thống tuần hoàn nhưng phổ biến nhất là kiểu hệ thống tuần hoàn dạng dài 18 cột và sau đó là hệ thống tuần hoàn dạng ngắn 8 cột.

5.2.1. Hệ thống tuần hoàn dạng dài (18 cột)

a) *Số thứ tự*

Trong hệ thống tuần hoàn, *số thứ tự của mỗi nguyên tố bằng số hiệu nguyên tử của nguyên tố đó.*

(1) Để ngắn gọn, cụm từ "nguyên tử của những nguyên tố có cùng số lớp electron" được viết là "những nguyên tố có cùng số lớp electron".

Ta biết rằng: số hiệu nguyên tử Z của một nguyên tố bằng số proton trong hạt nhân (bằng số điện tích hạt nhân), bằng số electron trong lớp vỏ nguyên tử.

Chẳng hạn, nguyên tố sắt chiếm ô thứ 26 trong hệ thống tuần hoàn, vậy số hiệu nguyên tử của sắt là 26; từ đó ta biết rằng trong hạt nhân nguyên tử có 26 hạt proton, điện tích hạt nhân là 26+ và ở lớp vỏ nguyên tử có 26 electron.

b) *Chu kì*

Chu kì gồm những nguyên tố mà nguyên tử của chúng có cùng số lớp electron (có cùng trị số n) chỉ khác nhau ở số electron của các lớp bên ngoài.

Mỗi khi hình thành một lớp electron mới lại xuất hiện một chu kì mới. Số thứ tự của chu kì ứng với số lớp electron.

Mỗi chu kì gồm một số nguyên tố nhất định ứng với số electron điền vào các lớp bên ngoài từ lúc bắt đầu xây dựng phân lớp ns (hiđrọ hoặc kim loại kiềm) đến khi kết thúc phân lớp np^6(các khí hiếm). Từ đó, ta hiểu được rằng chu kì nào cũng bắt đầu bằng một kim loại điển hình và kết thúc bằng một khí hiếm.

Khi điện tích hạt nhân tăng thì có sự điền tuần tự các electron bắt đầu từ obitan có năng lượng thấp nhất.

– Lớp vỏ thấp nhất (lớp K) có hai electron điền vào phân lớp 1s, *vì vậy chu kì 1 gồm 2 nguyên tố* (H → He).

– Lớp thứ hai (lớp L) có 8 electron điền vào các phân lớp $2s^22p^6$ (Li→ Ne), *vì vậy chu kì 2 gồm 8 nguyên tố.*

– Lớp thứ ba (M) có 8 electron điền vào các phân lớp $3s^23p^6$ (Na → Ar), *vì vậy chu kì 3 gồm 8 nguyên tố.*

– Tuy lớp thứ ba chưa đầy đủ nhưng vì năng lượng của phân lớp 3d hơi bị cao hơn phân lớp 4s, nên ở nguyên tố kali các electron 4s được điền vào trước, do đó *có sự hình thành sớm chu kì 4.* Sau đó, các electron tiếp theo mới bắt đầu điền vào phân lớp 3d trong dãy các nguyên tố chuyển tiếp (Se → Zn) rồi lại tiếp tục điền vào phân lớp 4p ở các nguyên tố sau.

Như vậy, so với chu kì 2 và chu kì 3, ở chu kì 4 có thêm 10 electron điền vào phân lớp 3d nên *chu kì 4 gồm 18 nguyên tố.*

– Chu kì 5 cũng tương tự như trên và gồm 18 *nguyên tố.*

– Trong chu kì 6, sau khi các electron được điền vào phân lớp 6s (Cs → Ba) và xuất hiện electron thứ nhất trên phân lớp 5d (La) thì bắt đầu xây dựng phân lớp 4f sâu hơn trong họ Lantan từ Ce → Lu. Chỉ sau khi điền đủ 14 electron vào phân lớp 4f thì các electron tiếp theo mới bắt đầu chiếm mức năng lượng 5d cao hơn (Hf → Hg) rồi sau đó, khi phân lớp 5d đã đầy đủ mới tiếp tục điền vào phân lớp 6p (Tl → Rn).

Bảng 2.11. Bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học (1999)

Ở điều kiện thường, phông chữ đậm ứng với trạng thái rắn, phông chữ đậm nghiêng ứng với trạng thái lỏng, phông chữ nghiêng ứng với trạng thái khí, phông chữ thường ứng với các nguyên tố tổng hợp.

	1 IA	2 IIA	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIIIB	9 VIIIB	10 VIIIB	11 IB	12 IIB	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA
1	1 *H*																	2 *He*
2	3 **Li** 1.0 1+	4 **Be** 1.5 2+											5 **B** 2.0 3+ Boron	6 **C** 2.5 4+,4-	7 *N*	8 *O*	9 *F*	10 *Ne* Neon
3	11 **Na** 0.9 1+	12 **Mg**											13 **Al**	14 **Si**	15 **P**	16 **S** Sulfur	17 *Cl*	18 *Ar* Argon
4	19 **K** Potassium	20 **Ca**	21 **Sc**	22 **Ti**	23 **V**	24 **Cr**	25 **Mn**	26 **Fe**	27 **Co**	28 **Ni** 1.8 2+ Nickel	29 **Cu**	30 **Zn**	31 ***Ga***	32 **Ge** 72.61	33 **As**	34 **Se**	35 ***Br***	36 *Kr* Krypton
5	37 **Rb**	38 **Sr**	39 **Y** 88.90585 Yttrium	40 **Zr** 91.224	41 **Nb** 92.90638	42 **Mo** 95.94	43 Tc 98.9063	44 **Ru** 101.57	45 **Rh** 102.9055	46 **Pd** 106.42	47 **Ag** 107.8682 Silver	48 **Cd** 112.411	49 **In** 114.82 Indium	50 **Sn** Tin	51 **Sb**	52 **Te**	53 **I** Iodine	54 *Xe* Xenon
6	55 ***Cs*** 132.90543 0.7 1+	56 **Ba** Barium	57 **La**	72 **Hf** 1.3 4+ Hafnium	73 **Ta** 1.5 5+ Tantalum	74 **W** 1.7 6+	75 **Re** 1.9 7+	76 **Os** 2.2 4+	77 **Ir** 2.2 4+	78 **Pt** 2.2 4+	79 **Au** 2.4 3+	80 ***Hg*** 1.9 2+ Mercury	81 **Tl** 1.8 1+	82 **Pb** Lead	83 **Bi** Bismuth	84 **Po** Polonium	85 **At** Astatine	86 *Rn* Radon
7	87 ***Fr***	88 **Ra**	89 **Ac**	104 Rf	105 Db 262.11 Dubnium	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Uun	111 Uuu	112 Uub		114 Uuq 289		116 Uuh 289		118 Uuo 293

6	58 **Ce**	59 **Pr**	60 **Nd** Neodymium	61 Pm	62 **Sm**	63 **Eu**	64 **Gd** 157.25 1.2 3+ Gadolinium	65 **Tb** 158.92534	66 **Dy** 162.50	67 **Ho** 164.93032	68 **Er** 167.26	69 **Tm** 168.93421	70 **Yb**	71 **Lu**
7	90 **Th** 1.3 4+ Thorium	91 **Pa**	92 **U**	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md Mendelevium	102 (No)	103 (Lr) Lawrencium

Như vậy, ở chu kì 6 có 32 electron điền vào các phân lớp $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$, so với các chu kì 4 và 5 thì có thêm 14 electron điền vào phân lớp 4f, nên *chu kì 6 gồm 32 nguyên tố.*

– Chu kì 7 cũng tương tự.

Hiện nay, *chu kì 7 còn là chu kì chưa đầy đủ* nhưng dự đoán theo quy luật trên, nó cũng phải có 32 nguyên tố.

Như vậy là, trong việc xây dựng các lớp electron của các chu kì lớn có sự vi phạm tính liên tục (trong chu kì 4 và 5, mỗi chu kì một lần; trong chu kì 6 và 7 mỗi chu kì hai lần): ở đó tạm thời bỏ qua phân lớp (n–1) và (n–2)f tương ứng để *sớm* xây dựng phân lớp ns, làm cho thuận lợi về mặt năng lượng.

Chẳng hạn, việc điền electron diễn ra theo sơ đồ $3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$ thay cho sơ đồ $3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$, là vì nếu electron tiếp tục điền vào lớp thứ ba đã đủ 8 electron thì sẽ gây ra một sự đẩy đáng kể. Khi điện tích hạt nhân tăng thì sự tăng sức hút của hạt nhân sẽ bù trừ cho tương tác đẩy của các electron, và bây giờ việc tiếp tục điền vào lớp bên trong trở nên thuận lợi hơn về mặt năng lượng.

– Trừ chu kì 1 ra, *từng cặp chu kì có số nguyên tố bằng nhau* (2, 8, 8, 18, 18, 32...)

Xét sơ đồ xây dựng các lớp electron bên ngoài của các nguyên tố từ chu kì 1 đến chu kì 7:

	1s	2s 2p	3s 3p	4s 3d 4p	5s 4d 5p	6s 4f 5d 6p	7s 5f 6d 7p
n =	1	2 2	3 3	4 3 4	5 4 5	6 4 5 6	7 5 6 7
l =	0	0 1	0 1	0 2 1	0 2 1	0 3 2 1	0 3 2 1
Chu kì	1	2	3	4	5	6	7
Số nguyên tố	2	8	8	18	18	32	
Cặp	1	2		3		4	

Đối với từng cặp chu kì, tuy trị số n khác nhau nhưng trị số l của lớp ngoài như nhau, số electron điền vào các lớp bên ngoài cũng như nhau kể từ lúc hình thành chu kì cho tới lúc kết thúc chu kì, như vậy số nguyên tố trong từng cặp chu kì bằng nhau.

c) *Nhóm*

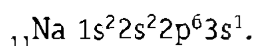
Nhóm là tập hợp các nguyên tố có cấu hình electron tương tự nhau, do đó có tính chất hoá học tương tự nhau.

Các nguyên tố trong cùng nhóm có số electron hoá trị bằng nhau (và bằng số thứ tự của nhóm). Electron hoá trị là những electron nằm bên ngoài các cấu hình bão hoà hay giả bão hoà $(n-1)s^2$, $(n-1)p^6$ hay $(n-1)d^{10}$..., chúng có khả năng tham gia vào việc hình thành liên kết hoá học.

Hệ thống tuần hoàn dài 18 cột chia các nguyên tố thành 8 nhóm A đánh số từ IA đến VIIIA và 8 nhóm B đánh số từ IB đến VIIIB. Mỗi nhóm A và B đều gồm một cột, riêng nhóm VIIIB gồm 3 cột.

– *Nhóm A* (thường được gọi là nhóm chính) gồm các nguyên tố mà electron "cuối cùng"[1] thuộc phân lớp s hoặc p.

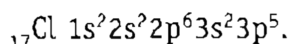
Ví dụ 1: Nguyên tố natri có cấu hình electron như sau:



$$_{11}Na\ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1.$$

Electron "cuối cùng" (electron số 11) ứng với phân mức năng lượng cao nhất là $3s^1$, vậy nguyên tố natri thuộc nhóm A.

Ví dụ 2: Nguyên tố clo có cấu hình electron như sau:



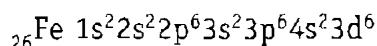
$$_{17}Cl\ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5.$$

Electron "cuối cùng" (electron thứ 17) ứng với phân mức năng lượng cao nhất là 3p, vậy nguyên tố clo thuộc nhóm A.

Tất cả các electron hoá trị của các nguyên tố nhóm A đều ở lớp ngoài cùng và bằng số thứ tự của nhóm.

– Nhóm B: Nhóm B gồm các nguyên tố mà electron "cuối cùng" thuộc phân lớp d hoặc f.

Ví dụ: Cấu hình electron của nguyên tố sắt là:



$$_{26}Fe\ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$$

Electron "cuối cùng" (electron thứ 26) ứng với phân mức năng lượng là 3d, vậy nguyên tố sắt thuộc nhóm B.

Cần lưu ý rằng electron "cuối cùng" ở đây không thuộc lớp ngoài cùng là lớp thứ tư.

5.2.2. Hệ thống tuần hoàn dạng ngắn (8 cột)

a) *Số thứ tự*

Số thứ tự các nguyên tố cũng giống như bảng dài 18 cột, nghĩa là số thứ tự của mỗi nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn bằng số hiệu nguyên tử của nguyên tố đó.

b) *Chu kì*

Trong hệ thống tuần hoàn dang ngắn, các chu kì lớn được cắt thành hai hàng: hàng trên 10 nguyên tố, hàng dưới 8 nguyên tố.

c) *Nhóm*

Hệ thống tuần hoàn dạng ngắn gồm 8 nhóm, đánh số từ I đến VIII.

---

(1) Electron "cuối cùng" là những electron ứng với phân mức năng lượng cao nhất trong nguyên tử. Trong nhiều trường hợp "electron cuối cùng" không thuộc lớp ngoài cùng.

Bảng 2.12. Hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học (dạng ngắn)

Chu kì	Hàng	Nhóm I	Nhóm II	Nhóm III	Nhóm IV	Nhóm V	Nhóm VI	Nhóm VII	Nhóm VIII			
		IA IB	IIA IIB	IIIB IIIA	IVB IVA	VB VA	VIB VIA	VIIB VIIA	VIIB			VIIA
1	I	H Hiđro 1,00779										He [illegible]
2	II	Li [illegible] Liti [illegible]	Be 4 Beri 9,0122	5 Bo 10,811 B	6 Cacbon 12,01115 C	7 Nitơ 14,007 N	8 Oxi 15,9994 O	[illegible] Flo 18,9984 F				Ne 10 Neon 20,183
3	III	Na 11 Natri 22,9898	Mg 12 Magie 24,312	13 Nhôm 26,9815 Al	14 Silic 28,086 Si	15 Photpho 30,9738 P	16 Lưu huỳnh 32,064 S	17 Clo 35,453 Cl				Ar 18 Agon 39,948
4	IV	K [illegible]	Ca [illegible]	Sc [illegible]	Ti [illegible] 47,90	V 23 Vanađi 50,942	Cr 24 Crom 51,996	Mn 25 Mangan 54,9380	Fe 26 Sắt 55,857	Co 27 Coban 58,9332	Ni 28 Niken 58,71	
	V	[illegible] Cu	[illegible] Zn	[illegible] ...,72 Ga	[illegible] Gemani 72,59 Ge	33 Asen 74,9216 As	34 Selen 78,96 Se	35 Brom 79,904 Br				Kr 36 Kripton 83,80
5	VI	Rb 37 Rubiđi 85,47	Sr 38 [illegible] 87,62	Y 39 [illegible] 88,905	Zr 40 [illegible] 91,22	Nb 41 [illegible] 92,906	Mo 42 Molipđen 95,94	Tc 43 [illegible] (99)	Ru 44 [illegible] 101,07	Rh 45 [illegible] 102,91	Pd 46 [illegible] 106,40	
	VII	47 Bạc 107,868 Ag	[illegible] 112,40 Cd	[illegible] 114,82 In	50 Thiếc 118,69 Sn	[illegible] Sb	[illegible] Te	[illegible] I				Xe [illegible]
6	VIII	Cs 55 Xesi 132,905	Ba 56 Bari 137,34	La 57 Lantan 138,91	Hf 72 Hafini 178,49	Ta [illegible]	W 74 [illegible]	Re [illegible]	Os [illegible]	Ir [illegible]	Pt [illegible]	
	IX	79 Vàng 196,967 Au	80 Thủy ngân 200,59 Hg	81 Tali [illegible] Tl	[illegible] Pb	[illegible] Bi	84 [illegible] Po	[illegible] Atatin At				Rn [illegible]
7	X	Fr 87 Franxi [illegible]	Ra 88 Rađi [illegible]	Ac [illegible]	Ku [illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]		
Oxit cao nhất		R_2O	RO	R_2O_3	RO_2	R_2O_5	RO_3	R_2O_7	RO_4			
Hợp chất với hiđro					RH_4	RH_3	RH_2	RH				

Họ Lantan

Ce [illegible]	Pr [illegible]	Nd [illegible]	Pm 61 (145)	Sm [illegible]	Eu 63 151,96	Gd 64 157,25	Tb 65 158,924	Dy 66 162,50	Ho 67 164,930	Er 68 167,26	Tu 69 168,934	Yb 70 173,04	Lu [illegible]

Số thứ tự

Nguyên tử khối

Họ Actin

Th [illegible]	Pa [illegible]	U [illegible]	Np 93 [illegible]	Pu 94 (242)	Am 95 (243)	Cm 96 (247)	Bk 97 (247)	Cf 98 (249)	Es 99 (254)	Fm [illegible]	Md [illegible]	No 102 (256)	Lr 103 (257)

Mỗi nhóm lại chia thành hai phân nhóm

– Phân nhóm chính (ứng với nhóm A trong hệ thống tuần hoàn dạng dài).

– Phân nhóm phụ (ứng với nhóm B trong hệ thống tuần hoàn dạng dài).

Riêng nhóm VIII bao gồm một phân nhóm chính là nhóm khí hiếm và ba phân nhóm phụ.

Trong hệ thống tuần hoàn dạng ngắn, *phân nhóm gồm các nguyên tố có số electron hoá trị bằng nhau và bằng số thứ tự của nhóm.*

5.2.3. Các nguyên tố được xếp xuống dưới bảng

Trong hệ thống tuần hoàn dạng ngắn cũng như dạng dài, có 14 nguyên tố họ Lantan ($_{58}Ce \rightarrow _{71}Lu$) và 14 nguyên tố họ Actini ($_{90}Th \rightarrow _{103}Lw$) thuộc nhóm IIIB (hay phân nhóm phụ nhóm III trong hệ thống tuần hoàn dạng ngắn) được xếp xuống dưới bảng. Các nguyên tố trong cùng họ có tính chất rất giống nhau.

5.2.4. Các khối nguyên tố

Dựa vào hệ thống tuần hoàn, ta có thể nhận ra được các khối nguyên tố. Các nguyên tố trong mỗi khối có những tính chất hoá học chung.

– Khối s: gồm các nguyên tố nhóm IA và nhóm IIA với cấu hình electron lớp ngoài cùng là ns^1 và ns^2.

– Khối p: gồm các nguyên tố từ nhóm IIIA đến nhóm VIIIA với cấu hình electron lớp ngoài cùng từ ns^2np^1 đến ns^2np^6.

– Khối d: (hay khối chuyển tiếp) gồm 3 dãy, mỗi dãy 10 nguyên tố với cấu hình electron các lớp ngoài là $(n-1)d^1s^2 \Rightarrow (n-1)d^{10}s^2$.

– Khối f: các nguyên tố khối f xuất hiện.

+ Ở chu kì 6 sau lantan gồm 14 nguyên tố (gọi là họ Lantan).

+ Ở chu kì 7 sau actini cũng gồm 14 nguyên tố (gọi là họ Actini).

Như vậy, ở khối f gồm 28 nguyên tố có cấu hình electron từ $(n-2)f^1(n-1)d^1ns^2 \rightarrow (n-2)f^{14}(n-1)d^1ns^2$, trong đó n = 6 và n = 7.

Bảng 2.13. Các khối nguyên tố

1s			1s
2s			2p
3s			3p
4s		3d	4p
5s		4d	5p
6s	*	5d	6p
7s	**	6d	

*	4f
**	5f

5.3. Hệ thống tuần hoàn và sự biến đổi tính chất của các nguyên tố

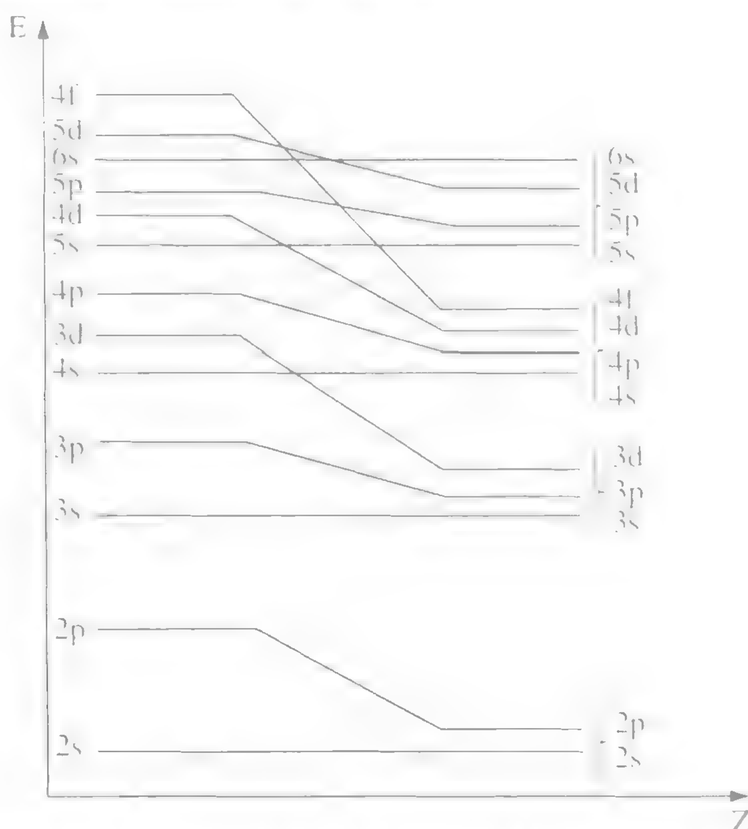
Ta đã biết rằng, tính chất hoá học của một nguyên tố trước hết được xác định bởi số electron ở lớp ngoài cùng và năng lượng liên kết của chúng với hạt nhân nguyên tử.

Số electron ở lớp bên ngoài quy định trạng thái hoá trị đặc trưng cho một nguyên tố và do đó quyết định kiểu hợp chất: hiđrua, oxit, hiđroxit, muối v.v... Điều đó suy đến cùng cũng là nguyên nhân sắp xếp các nguyên tố vào cùng một nhóm trong hệ thống tuần hoàn.

Năng lượng liên kết của các electron thuộc lớp bên ngoài với hạt nhân quy định sự khác nhau về tính chất của các nguyên tố và các hợp chất cùng kiểu của chúng trong chu kì và các nhóm. Các tính chất đó là: tính kim loại, phi kim, tính axit – bazơ của các hiđrua, hiđroxit, tính oxi hoá – khử v.v...

Khi chuyển từ lớp nọ sang lớp kia, số lớp electron tăng lên thì nói chung năng lượng liên kết của các electron bên ngoài giảm đi; còn trong một lớp, khi điện tích hạt nhân tăng lên, năng lượng liên kết của các electron bên ngoài tăng lên.

Đồ thị dưới đây thể hiện sự phụ thuộc của năng lượng liên kết của electron trong các lớp và phân lớp theo chiều tăng của điện tích hạt nhân.



Hình 2.21. Sự phụ thuộc của năng lượng liên kết của e theo Z

Sau đây ta nêu một số quy luật quan trọng nhất về sự biến đổi tính chất của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

– *Trong phạm vi một chu kì, khi đi từ trái sang phải theo chiều tăng của số thứ tự các nguyên tố, tính kim loại giảm dần, tính phi kim tăng dần (quy luật theo hàng ngang).*

– *Trong phạm vi một nhóm A* (hay phân nhóm chính), khi đi từ trên xuống dưới, theo chiều tăng của số thứ tự các nguyên tố, tính kim loại tăng dần, tính phi kim giảm dần (quy luật theo cột dọc).

Như vậy, mỗi nguyên tố hoá học và mỗi ô trong hệ thống tuần hoàn chứa nguyên tố đó là giao điểm của hai quy luật trên; chính điều đó đã xác định một cách đơn trị tính chất của một nguyên tố.

Vì mỗi ô ứng với một số thứ tự xác định nên dựa vào số thứ tự đó có thể dự đoán được những tính chất hoá học đặc trưng của nguyên tố ứng với vị trí của ô.

Các nguyên tố thuộc chu kì 1 là hiđro và heli (các electron mới điền vào lớp thứ nhất) có nhiều tính chất độc đáo không hề gặp ở các nguyên tố khác. Ví dụ: tính chất của ion hiđro H^+, tính chất của heli lỏng v.v...

Các nguyên tố thuộc chu kì 2 mang tính chất của các nguyên tố đầu họ rất khác với những nguyên tố khác trong cùng nhóm. Chẳng hạn, liti có những tính chất hoá học giống magie hơn là giống các kim loại kiềm khác trừ hoá trị. Cũng tương tự như vậy, beri giống nhôm, bo giống silic v.v... Đó là do năng lượng của các electron ngoài cùng thuộc lớp thứ hai thấp hơn nhiều so với các lớp khác và hơn nữa ở lớp thứ hai chỉ có 4 obitan (chứa tối đa 8 electron).

Ở các nguyên tố họ d, trong một chu kì, các tính chất của chúng ít khác nhau hơn so với các nguyên tố họ s và p vì ở những nguyên tố này không có sự xây dựng electron lớp ngoài cùng.

Tính chất của các nguyên tố họ Lantan và họ Actini rất ít khác nhau, vì ở đó có sự xây dựng lớp vỏ thứ ba kể từ ngoài vào. Vì vậy, việc tách các hợp chất của chúng là một vấn đề rất phức tạp.

6. SỰ PHÂN LOẠI CÁC NGUYÊN TỐ VÀ NHỮNG TÍNH CHẤT ĐẶC TRƯNG CỦA MỖI LOẠI

Dựa vào cấu hình electron, có thể chia các nguyên tố thành bốn loại:

1. Các khí hiếm.

2. Các nguyên tố điển hình.

3. Các nguyên tố chuyển tiếp.

4. Các nguyên tố họ Lantan và Actini.

6.1. Các khí hiếm

Nguyên tử của chúng có cấu hình electron ns^2np^6 (trừ heli có cấu hình $1s^2$).

Ở các nguyên tố này, tất cả các lớp electron đều đã bão hoà hoặc giả bão hoà. Sự giả bão hoà xảy ra khi có 8 electron hoặc 18 electron ở những lớp M, N, O, P... (nếu là bão hoà thì lớp M phải có 18; lớp N: 32; lớp O: 50 v.v... tức là phải bằng $2n^2$ electron).

Tất cả các electron đều nằm ở các phân lớp đã đầy đủ. Đó là những cấu hình electron rất bền, các nguyên tử không liên kết với nhau nên phân tử khí hiếm chỉ gồm một nguyên tử. Chúng rất khó hoá lỏng và hoá rắn vì giữa các nguyên tử chỉ có lực Van de Van yếu.

Cũng do cấu hình bền nên năng lượng ion hoá của các nguyên tử khí hiếm rất cao.

Ngay từ khi tìm ra khí hiếm, trong một thời gian dài, người ta cho rằng chúng không có khả năng tạo ra hợp chất hoá học nên gọi là *khí trơ*.

Cho đến năm 1962, nhà hoá học Canađa là Barlett mới tìm ra hợp chất hoá học đầu tiên của khí hiếm là Xenonhexafloroplatinat – $Xe[PtF_6]$ trong đó có cation Xe^+ và anion $[PtF_6]^-$.

Rồi sau đó, người ta điều chế được: XeF_2, XeF_4, XeF_6, XeO_3, XeO_6^{4-}, KrF_2, RnF_2 v.v...

Sự tồn tại các hợp chất của Rn, Xe, Kr với các số oxi hoá khác nhau và nhất là sự tồn tại của các hợp chất như XeO_4, $NaXeO_6$... cho phép xếp các khí hiếm vào nhóm VIIIA.

6.2. Các nguyên tố điển hình (các nguyên tố khối s và khối p)

Ở các nguyên tố loại này, tất cả các lớp electron đều bão hoà hoặc giả bão hoà trừ lớp ngoài cùng.

Lớp ngoài cùng có cấu hình electron từ ns^1 đến ns^2np^6.

Tính chất hoá học của các nguyên tố thuộc loại này chủ yếu tuỳ thuộc vào khuynh hướng thu hay nhường electron để có cấu hình khí hiếm.

Thuộc loại này có các kim loại mạnh và tất cả các phi kim.

– *Các kim loại mạnh*

Nguyên tử của chúng có từ 1 đến 3 electron bên ngoài cấu hình khí hiếm và có khả năng *tạo thành các cation có cấu hình "trơ"*.

Những ion này thường không màu và nghịch từ[1]. Các nguyên tố này có rất ít khuynh hướng tạo thành liên kết cộng hoá trị. Hoá trị của chúng thường không thay đổi hoặc rất ít thay đổi.

Đó là các *kim loại kiềm, kiềm thổ, các nguyên tố nhóm IIIA (trừ bo).*

(1) Xem mục từ tính của kim loại chuyển tiếp ở dưới.

– *Các phi kim*

Gồm các nguyên tố có từ 4 đến 7 electron lớp ngoài cùng. Chúng có thể *tạo thành các liên kết cộng hoá trị* và chính những liên kết đó là đặc trưng cho tương tác hoá học của chúng.

Đối với đa số các nguyên tố loại này cũng có thể *tạo thành các anion đơn với cấu hình ns^2np^6*, nhưng hầu hết các anion này chỉ có thể tồn tại ở trạng thái rắn (trừ các anion halogenua).

Một số nguyên tố nặng nhất trong khu vực này của hệ thống tuần hoàn thật ra là những kim loại do khả năng mất đi (N–2) electron (N là số nhóm) để tạo thành cation (ví dụ: Sn^{2+}, Pb^{2+}). Tuy vậy, chúng cũng có khả năng tạo thành liên kết cộng hoá trị khi sử dụng tất cả các electron bên ngoài (ví dụ: $SnCl_4$, $PbCl_4$...).

Việc tách các electron ra khỏi nguyên tử ngày càng khó khăn khi số thứ tự của nhóm tăng lên. Vì vậy, đường phân chia ranh giới tương đối của kim loại, phi kim chạy dọc theo đường chéo của hệ thống tuần hoàn từ bo đến telu (thật ra không có ranh giới dứt khoát giữa kim loại và phi kim).

6.3. Các nguyên tố chuyển tiếp (các nguyên tố khối d)

Gồm những nguyên tố có hai lớp electron bên ngoài chưa đầy đủ, trong đó phân lớp (n–1)d ứng với cấu hình $(n-1)d^{1\rightarrow 9}$.

Theo như trên thì có bốn dãy nguyên tố chuyển tiếp ứng với các phân lớp 3d, 4d, 5d và 6d (chưa đầy đủ). Các dãy này bắt đầu từ các nguyên tố nhóm IIIB (Sc, Y, La, Ac) và kết thúc bằng các nguyên tố Ni, Pd, Pt (dãy thứ tư chưa hoàn thành).

Tuy vậy, người ta thường xếp 6 nguyên tố Cu, Ag, Au, Zn, Cd, Hg vào loại các nguyên tố chuyển tiếp do tính chất vật lí và hoá học có nhiều điểm giống các nguyên tố chuyển tiếp.

Như vậy, người ta thường xếp bốn dãy nguyên tố chuyển tiếp sau:

Sc ———————→ Zn

Zn - - - - - - - - - → Cd

La - - - - - - - - - → Hg

Ac ———————→ ...

Tất cả các nguyên tố chuyển tiếp đều thuộc các nhóm B, gồm 33 nguyên tố. Tất cả đều là kim loại, có nhiệt độ nóng chảy, nhiệt độ sôi cao hơn các kim loại thuộc nhóm A.

Vì có phân lớp (n–1)d chưa đầy đủ nên có một số tính chất đặc trưng so với các nguyên tố nhóm A như sau:

– Có nhiều trạng thái oxi hoá, do đó, có sự thay đổi tính axit – bazơ, tính oxi hoá – khử của các hợp chất trong một giới hạn rộng rãi (Bảng 2.14).

Bảng 2.14. Sự thay đổi tính axit – bazơ và màu sắc của hợp chất các nguyên tố chuyển tiếp khi thay đổi trạng thái oxi hoá

Trạng thái oxi hoá	Oxit	Hiđroxit	Tính axit bazơ	Muối tương ứng
+2	MnO mangan(II) oxit lục	$Mn(OH)_2$ mangan(II) hiđroxit	Bazơ	$MnSO_4$ mangan(II) sunfat
+3	Mn_2O_3 mangan(III) oxit nâu	$Mn(OH)_3$ mangan(III) hiđroxit	Bazơ yếu	$Mn_2(SO_4)_3$ mangan(III) sunfat lục
+4	MnO_2 mangan(IV) oxit đen	H_2MnO_3 [$MnO(OH)_2$] axit manganơ	Lưỡng tính	$CaMnO_3$ canxi manganơ
+6	MnO_3 mangan(VI) oxit hồng	H_2MnO_4 axit manganic	Axit	K_2MnO_4 kali manganat lục
+7	Mn_2O_7 mangan(VII) oxit lục đậm	$HMnO_4$ axit pemanganic		$KMnO_4$ kali pemanganat tím
+2	CrO crom(II) oxit đen	$Cr(OH)_2$ crom(II) hiđroxit	Bazơ	$CrCl_2$ crom(II) clorua khan: không màu, trong dd màu xanh
+3	Cr_2O_3 crom(III) oxit lục	$Cr(OH)_3$ crom(III) hiđroxit	Lưỡng tính	$CrCl_3$ crom(III) clorua, khan: tím, trong dd: màu xanh $KCrO_2$ kali cromit, màu lục
+6	CrO_3 crom(IV) oxit đỏ thẫm	H_2CrO_4 [$CrO_2(OH)_2$] axit cromic $H_2Cr_2O_7$ [$Cr_2O_5(OH)_2$] axit đicromic	Axit yếu Axit	K_2CrO_4 kali cromat, vàng $K_2Cr_2O_7$ kali đicromat, da cam

– Hợp chất thường có nhiều màu (Bảng 2.14).

– Các đơn chất và hợp chất thường có hoạt tính xúc tác.

– Có nhiều khả năng tạo phức chất.

– Hợp chất thường có tính thuận từ.

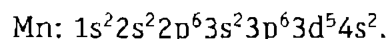
Ta lần lượt xét cụ thể hơn năm đặc điểm trên.

6.3.1. Có nhiều trạng thái oxi hoá

Đối với các nguyên tố chuyển tiếp, các electron hoá trị nằm ở phân lớp ns và (n–1)d. Phân lớp ns có mức năng lượng xấp xỉ phân lớp (n–1)d nên các electron dễ dàng dịch chuyển từ phân lớp ns đến phân lớp kia.

Lấy nguyên tố mangan làm ví dụ.

Cấu hình electron của mangan ở trạng thái cơ bản:



Mn: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$.

Mangan có thể thể hiện các trạng thái oxi hoá II, III, IV, V,VI, VII.

Mn^{II} có cấu hình electron $[Ar]3d^5$.

Mn^{III} có cấu hình electron $[Ar]3d^4$.

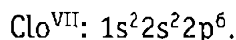
Mn^{IV} có cấu hình electron $[Ar]3d^3$.

Mn^{V} có cấu hình electron $[Ar]3d^2$.

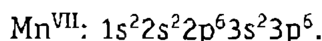
Mn^{VI} có cấu hình electron $[Ar]3d^1$.

Mn^{VII} có cấu hình electron $[Ar]3d^0$.

Ở trạng thái oxi hoá cao nhất ứng với số nhóm, mangan có tính chất hoá học gần với tính chất hoá học của clo ở cùng nhóm VII (nhưng là nhóm VIIA). Ở đây, cả clo và mangan đều sử dụng cả 7 electron hoá trị để hình thành liên kết hoá học, cả clo và mangan đều có cấu hình electron của khí hiếm.



$$Clo^{VII}: 1s^2 2s^2 2p^6.$$



$$Mn^{VII}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6.$$

Sự giống nhau về cấu hình electron dẫn tới sự giống nhau về tính chất của các hợp chất ứng với số oxi hoá VII của mangan và clo.

Chẳng hạn, Mn_2O_7 và Cl_2O_7 đều là chất lỏng ở điều kiện thường, đều kém bền, đều là anhiđrit của axit mạnh.

Hai axit pemanganic $HMnO_4$ và pecloric $HClO_4$ và các muối tương ứng chẳng hạn $KMnO_4$ và $KClO_4$ đều là những chất oxi hoá mạnh.

Trái lại, *ở trạng thái oxi hoá càng thấp, tính chất hoá học của mangan càng khác xa tính chất của clo.*

Đó là vì ở trạng thái oxi hoá thấp, ion mangan còn lại các electron (n 1)d, còn đối với clo thì còn lại các electron s và p. Vì vậy, các hợp chất của clo và mangan ứng với các trạng thái oxi hoá thấp có tính chất khác nhau. Ví dụ: Cl_2O: trạng thái khí, là anhiđrit của axit hipoclorua HClO; MnO: trạng thái tinh thể là oxit bazơ, ứng với bazơ $Mn(OH)_2$.

6.3.2. Màu sắc

Hợp chất của các nguyên tố chuyển tiếp – hợp chất ion cũng như hợp chất cộng hoá trị – thường có màu, trong khi đó đối với các nguyên tố không chuyển tiếp, việc thể hiện màu nói chung là hiếm.

Màu sắc gây ra do sự hấp thụ có chọn lọc các sóng ánh sáng có độ dài sóng ứng với một màu nhất định. Điều đó xảy ra trong trường hợp lượng tử ánh sáng có năng lượng ε:

$$\varepsilon = h\nu$$

h: là hằng số Planck

$\nu = \frac{c}{\lambda}$; trong đó: c là tốc độ của ánh sáng trong chân không.

λ là bước sóng ứng với hiệu số năng lượng của hai obitan lân cận của electron trong nguyên tử.

Sự hấp thụ năng lượng ánh sáng làm cho nguyên tử ở trạng thái kích thích; khi đó một số eletron chuyển lên mức năng lượng cao hơn.

Vì hiệu số năng lượng của electron nằm ở phân mức năng lượng ns và (n–1)d của các nguyên tố chuyển tiếp không lớn, độ dài sóng hấp thụ nằm trong khoảng từ 4000 Å đến 7000 Å nên hợp chất của chúng có màu. Nếu hiệu số năng lượng ε lớn hơn thì các hợp chất của chúng không thể hấp thụ ánh sáng vùng nhìn thấy mà là vùng tử ngoại...

Ta lấy vài ví dụ cụ thể.

Thực nghiệm đã chứng tỏ rằng:

Nếu trộn màu đỏ + lục + xanh sẽ ra → trắng

đỏ + lục → vàng

Ngược lại, nếu trắng – (đỏ + xanh) chẳng hạn bị hấp thụ → lục.

trắng – xanh → (đỏ + lục) vàng

Chẳng hạn khi chiếu ánh sáng trắng đi qua dung dịch muối Ni^{2+} thì dung dịch sẽ hấp thụ màu xanh (4000 Å) và đỏ (6800 Å), chỉ có màu lục đi qua nên ta thấy được dung dịch Ni^{2+} có màu lục.

Dung dịch cromat CrO_4^{2-} có màu vàng (5800 Å) vì màu xanh bị dung dịch hấp thụ, chỉ còn màu lục và đỏ (lục + đỏ → vàng) đi qua nên ta thấy được màu vàng.

Cần lưu ý rằng ion của các nguyên tố chuyển tiếp có các obitan d đã đầy đủ không có màu. Ví dụ:

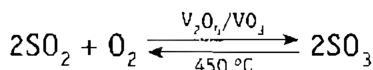
$Se^{3+}_{(aq)}$	d^0	không màu;
$Ti^{3+}_{(aq)}$	d^1	hồng;
$Cr^{3+}_{(aq)}$	d^3	lục;
$Co^{2+}_{(aq)}$	d^7	hồng;
$Cu^{2+}_{(aq)}$	d^9	xanh;
$Cu^{+}_{(aq)}$	d^{10}	không màu;
$Zn^{2+}_{(aq)}$	d^{10}	không màu.

6.3.3. Hoạt tính xúc tác

Các nguyên tố chuyển tiếp ở dạng đơn chất cũng như hợp chất thường có hoạt tính xúc tác.

Hoạt tính xúc tác của các nguyên tố chuyển tiếp phụ thuộc chủ yếu vào khả năng tồn tại nhiều trạng thái oxi hoá (để tạo ra với các chất phản ứng nhiều hợp chất trung gian không bền) và khả năng tạo ra phức chất.

Chẳng hạn, trong phương pháp tiếp xúc để điều chế axit sunfuric, các hợp chất của vanađi ở trạng thái oxi hoá +5 (V_2O_5 hay vanađat VO_3^-) được dùng để oxi hoá SO_2 thành SO_3.

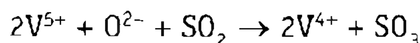


$$2SO_2 + O_2 \underset{450\,^\circ C}{\overset{V_2O_5/VO_3^-}{\rightleftharpoons}} 2SO_3$$

Thật ra quá trình diễn ra theo hai giai đoạn:

- *Ở giai đoạn 1:*

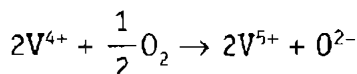
V^{5+} với sự có mặt của ion O^{2-} chuyển SO_2 thành SO_3 đồng thời V^{5+} bị khử tới V^{4+}



$$2V^{5+} + O^{2-} + SO_2 \rightarrow 2V^{4+} + SO_3$$

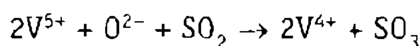
- *Ở giai đoạn 2:*

V^{5+} được tái sinh bởi oxi

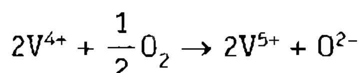


$$2V^{4+} + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow 2V^{5+} + O^{2-}$$

- *Phản ứng chung* là tổng của hai giai đoạn



$$2V^{5+} + O^{2-} + SO_2 \rightarrow 2V^{4+} + SO_3$$



$$2V^{4+} + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow 2V^{5+} + O^{2-}$$



Tổng: $$SO_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow SO_3$$

Các nguyên tố chuyển tiếp và hợp chất có khả năng tạo ra với các chất tham gia phản ứng một cơ chế mới làm giảm năng lượng hoạt hoá của phản ứng, do đó mà làm tăng tốc độ phản ứng.

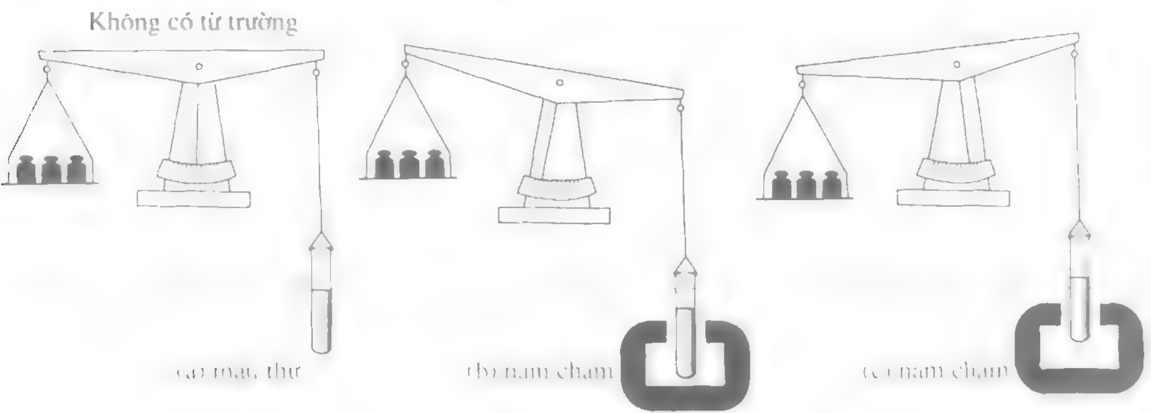
6.3.4. Từ tính của các nguyên tố chuyển tiếp

a) *Từ tính của các chất: chất thuận từ, chất nghịch từ*

Hầu hết các chất như muối ăn, phấn... không bị từ trường hút, chúng được gọi là chất *nghịch từ* (trên thực tế chúng bị từ trường đẩy nhẹ).

Những chất bị từ trường hút như các mảnh sắt, thép, niken... được gọi là chất *thuận từ*.

Dưới đây là sơ đồ một dụng cụ dùng để đo từ tính của một chất.



Hình 2.22. Dụng cụ đo từ tính của một chất

Ống đựng chất cần đo từ tính (mẫu thử).

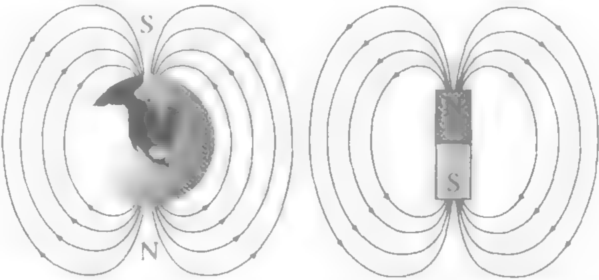
(a)– Khi chưa có từ trường. Vị trí và khối lượng của mẫu thử được xác định.

(b)– Khi có từ trường, chất thuận từ bị hút vào trường (chẳng hạn Cu(II) sunfat).

(c)– Chất nghịch từ bị từ trường đẩy nhẹ.

Năm 1600, Willson Gilbert kết luận rằng Quả Đất cũng là một nam châm hình cầu cực lớn làm phát sinh một từ trường bao quanh hành tinh chúng ta.

Hình dưới đây biểu diễn từ trường của Quả Đất và của một thanh nam châm. (Hình 2.23)

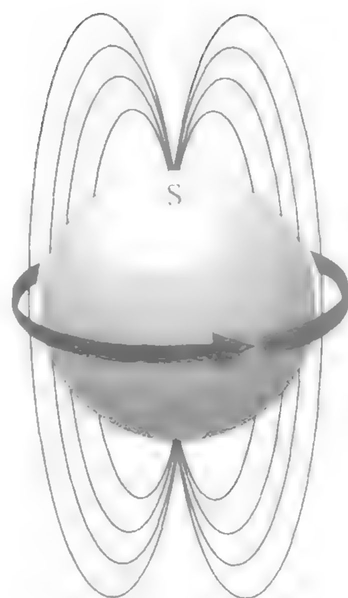


Hình 2.23. Từ trường của Quả Đất và từ trường của thanh nam châm

Từ trường phát ra từ một đầu được gọi một cách tùy ý là cực bắc của nam châm (kí hiệu là N chữ đầu của từ North có nghĩa là phương bắc) và vòng về cực nam của nam châm (kí hiệu là S chữ đầu tiên của từ South có nghĩa là phương nam).

Các cực cùng tên của nam châm (N-N hay S-S) đẩy nhau, còn các cực ngược nhau (N-S) thì hút nhau. Vì kim nam châm của địa bàn chỉ cực bắc địa lí của Quả Đất, điều đó phải có nghĩa *là cực bắc địa lí của Quả Đất là cực từ nam của Quả Đất.*

b) *Tính thuận từ và các electron tự do*



Hình 2.24. Spin của eletron

Hiện tượng thuận từ gây ra bởi spin của electron. Người ta đã xác minh bằng thực nghiệm rằng: một electron trong nguyên tử gây ra một từ trường do sự quay của một phần tử tích điện. Mỗi electron có từ trường với cực nam và cực bắc nghĩa là xử sự như một thanh nam châm tí hon.

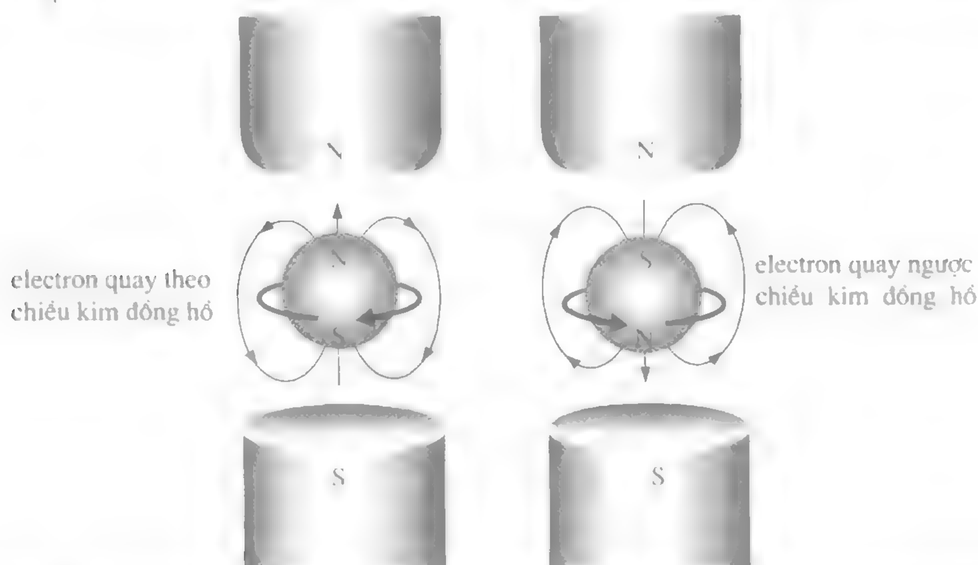
Trong nguyên tử và phân tử, electron chuyển động phát sinh ra một từ trường có đặc tính y hệt (trừ cường độ) từ trường sinh ra bởi một thanh nam châm hay Quả Đất.

Như phần trên đã nói, trong từ trường ngoài, spin của electron chỉ có hai khả năng định hướng ứng với số lượng tử từ spin.

$$m_s = +\frac{1}{2} \text{ và } m_s = -\frac{1}{2}$$

Trong nguyên tử hiđro chỉ có 1 electron và có thể nhận $m_s = +\frac{1}{2}$ hay $m_s = -\frac{1}{2}$. Bằng thực nghiệm người ta thấy rằng các nguyên tử hiđro có tính *thuận từ*; khi đặt vào một từ trường ngoài, nam châm electron song song với hướng của từ trường đó và chịu một sức hút.

Trong nguyên tử heli cả hai electron đều chiếm một obitan và người ta quan sát thấy heli có tính *nghịch từ*. Sở dĩ như vậy vì 2 electron trong cùng một obitan có spin ngược dấu nhau: chúng đã *ghép đôi*. Điều đó có nghĩa là từ trường của một electron $\overset{N}{\underset{S}{\uparrow}}$ bị trung hòa bởi từ trường của một electron kia có spin ngược dấu $\overset{S}{\underset{N}{\downarrow}}$.



Hình 2.25. Trong từ trường ngoài, "nam châm electron" chỉ có thể có hai định hướng và ứng với hai số lượng tử spin là $m_s = +\frac{1}{2}$ và $m_s = -\frac{1}{2}$.

Nói chung, tính *thuận từ* thể hiện ở những chất trong đó nguyên tử chứa electron *chưa ghép đôi.*

Các nguyên tử trong các chất ở đó tất cả các electron *đã ghép đôi* (với các electron có spin ngược dấu) đều thể hiện tính *nghịch từ.*

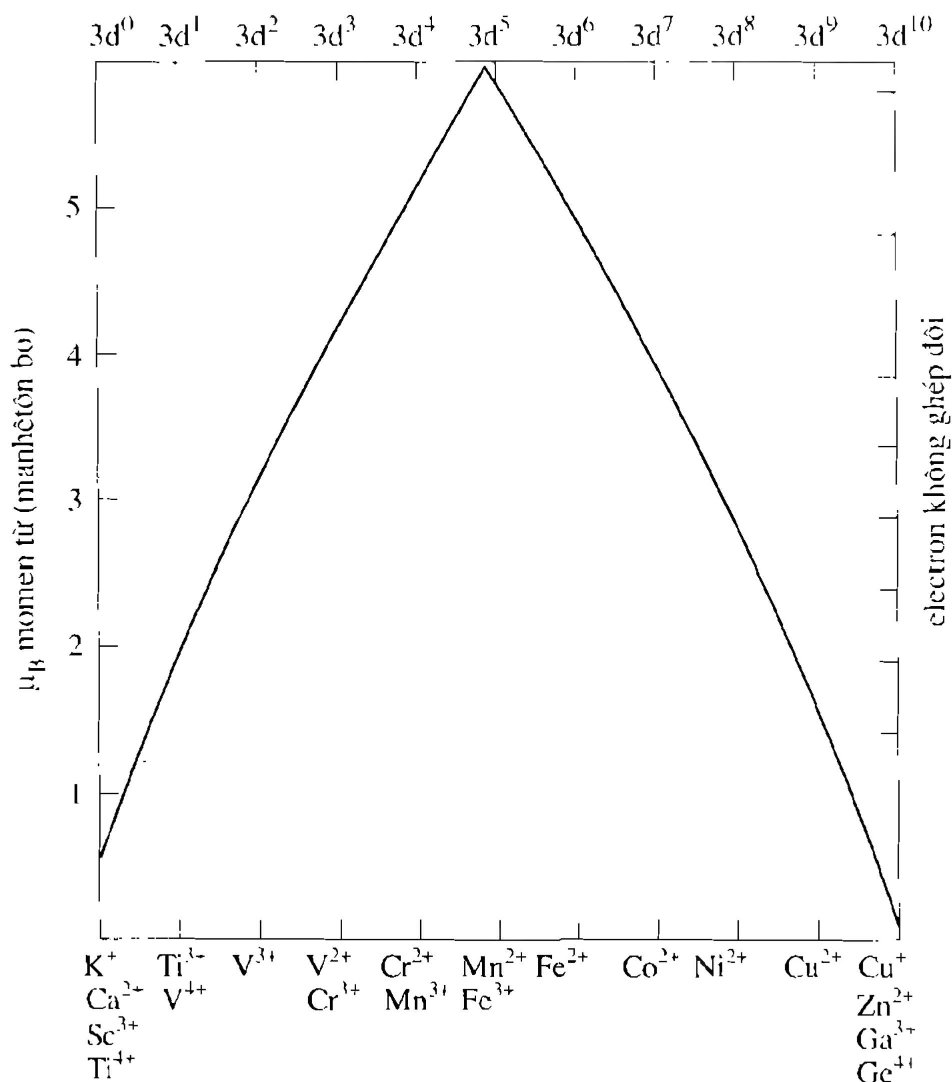
Từ tính (đối với một mol chất) tăng khi tăng số electron độc thân.

c) *Từ tính của các nguyên tố chuyển tiếp*

Đa số các nguyên tố chuyển tiếp và ion có một hoặc nhiều electron độc thân nên có tính thuận từ.

Như trên đã nêu, tính thuận từ tăng khi tăng số electron độc thân.

Hình 2.26 dưới đây thể hiện mối liên quan giữa số electron độc thân và từ tính của một số nguyên tố chuyển tiếp.



Hình 2.26. Mối liên quan giữa số electron không ghép đôi và từ tính

Momen từ là thước đo từ tính của các chất. Trong trường hợp đơn giản, momen từ của n electron độc thân được xác định bằng công thức sau và được biểu diễn theo đơn vị manhêton bo (μ_B).

$$\mu_B = \sqrt{n(n+2)}\mu_B$$

Theo đó thì khi xác định được momen từ μ bằng thực nghiệm, có thể biết được số electron độc thân n (và ngược lại).

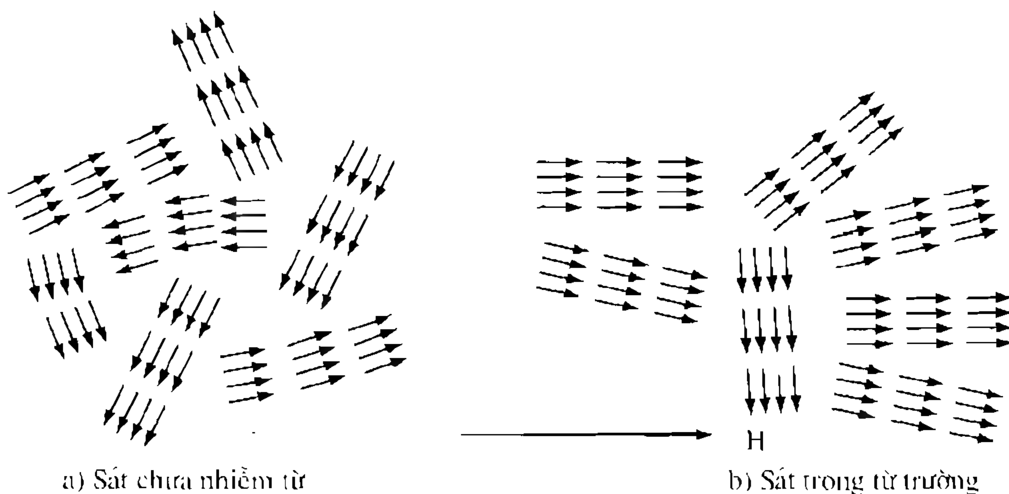
Chỉ có các kim loại Fe, Co, Ni *có tính sắt từ* ở dạng đơn chất. Các chất sắt từ có tính thuận từ mạnh gấp hàng nghìn lần so với các chất thuận từ khác.

Khác với tính thuận từ và nghịch từ, tính sắt từ là tính chất của mạng lưới tinh thể chứ không phải là tính chất của nguyên tử hay phân tử, vì vậy chỉ có các chất rắn mới có tính sắt từ.

Trong tinh thể của các chất sắt từ (như Fe chẳng hạn), tồn tại những "miền từ" có kích thước cỡ 10^{-2} đến 10^{-5} cm, trong đó chứa hàng triệu nguyên tử mà tất cả các momen từ của chúng đều song song với nhau.

Trong tinh thể sắt chưa nhiễm từ thì những miền khác nhau sắp xếp hoàn toàn tuỳ tiện. Tuy nhiên, trong từ trường các momen riêng biệt có khuynh hướng sắp xếp song song với từ trường, như vậy các miền từ tăng cường lẫn nhau.

Nếu khi đưa ra ngoài từ trường mà các miền vẫn còn song song thì sắt vẫn giữ momen từ và trở thành nam châm vĩnh cửu.



a) Sắt chưa nhiễm từ b) Sắt trong từ trường

Hình 2.27. Các miền từ trong sắt

6.4. Các nguyên tố họ Lantan và họ Actini

Các nguyên tố họ Lantan và họ Actini có ba lớp electron bên ngoài chưa đầy đủ, trong đó có phân lớp (n−2)f. Nhìn chung, nguyên tử của các nguyên tố này có cấu hình electron:

$$(n-2)f^{1\to 14}(n\ \ 1)d^{1\ \text{hoặc}\ 0}ns$$

Chúng tạo thành các cation và các hợp chất cộng hoá trị trong đó nguyên tử có hai phân lớp (n–1)d và (n–2)f chưa đầy đủ.

Thuộc loại này có hai dãy nguyên tố:

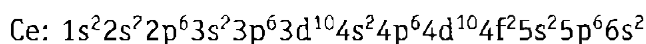
- 14 nguyên tố họ Lantan (hay còn gọi là các lantanit).
- 14 nguyên tố họ Actini (hay còn gọi là các actinit).

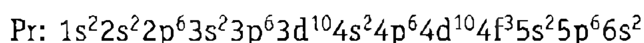
Tất cả các lantanit đều cho các cation hoá trị 3, tạo thành các muối bền và về nhiều mặt (hầu như tất cả) giống các muối tương ứng của Se và Y.

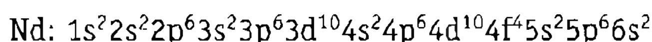
Trong số các đặc tính của họ nguyên tố này thì đặc tính chủ yếu là có hoá trị bất thường đối với nguyên tố ở đầu, ở giữa và ở cuối dãy. (Ce, Tb có hoá trị 4 bền; Eu, Yb có hoá trị 2 bền).

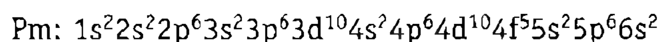
Cũng giống như các nguyên tố chuyển tiếp và cũng do những nguyên nhân tương tự, các lantanit cho các ion có màu và thuận từ.

Tính chất của các lantanit rất giống nhau, cấu hình electron của 14 nguyên tố trong họ chỉ khác nhau ở phân lớp 4f. Ví dụ:

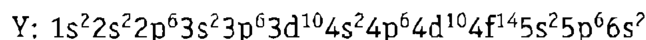

Ce: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^2 5s^2 5p^6 6s^2$


Pr: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^3 5s^2 5p^6 6s^2$


Nd: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^4 5s^2 5p^6 6s^2$


Pm: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^5 5s^2 5p^6 6s^2$

... ...


Y: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 6s^2$

Phân lớp (n – 2)f ở lớp thứ ba kể từ ngoài vào nên ít ảnh hưởng đến tính chất của các nguyên tố trong họ.

Tính chất của các actinit cũng tương tự như các lantanit nhưng còn phức tạp hơn.

Về nhiều mặt, Th tương tự Ce nhưng những nguyên tố tiếp sau từ Pa đến Am đã thể hiện những đặc tính mà không nguyên tố nào trong hệ thống tuần hoàn có cả.

Tuy nhiên, đến Cm thì tính chất của nó rất giống với Gd và các nguyên tố tiếp theo lại giống nhiều với các lantanit tương ứng.

6.5. Khả năng tạo phức chất

Một trong những tính chất đặc trưng nhất của các nguyên tố chuyển tiếp là có nhiều khả năng tạo thành phức chất bền.

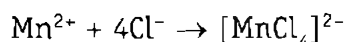
Sở dĩ như vậy vì các nguyên tố chuyển tiếp có các obitan (n–1)d tự do (vì phân lớp d chưa đầy đủ) nên dễ nhận các cặp electron chưa liên kết của các phối tử để tạo thành liên kết phối trí trong các phức chất.

Ta hãy xét một vài ví dụ.

a) Sự tạo thành phức $[MnCl_4]^{2-}$ (tetracloro manganat (II))

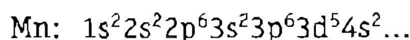
Thực nghiệm cho biết đây là một ion phức có tính thuận từ (trong ion này còn có các electron độc thân).

Sự hình thành phức này được mô tả như sau:

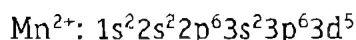


$$Mn^{2+} + 4Cl^- \rightarrow [MnCl_4]^{2-}$$

– Cấu hình electron của nguyên tử Mn và ion Mn^{2+}



$$Mn:\ 1s^22s^22p^63s^23p^63d^54s^2...$$

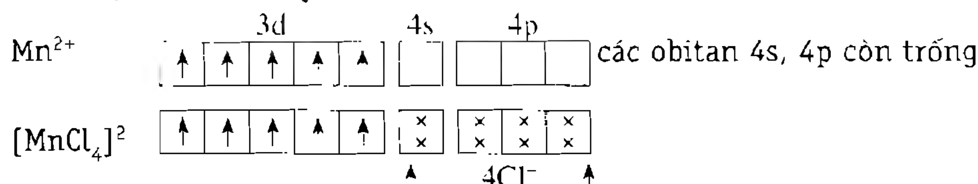


$$Mn^{2+}:\ 1s^22s^22p^63s^23p^63d^5$$

(các obitan 4s, 4p còn trống)

– Muối ion clorua [:C̈l:] cho một cặp electron chưa liên kết để tạo thành liên kết cho – nhận (liên kết phối trí) với ion trung tâm Mn^{2+}.

Sơ đồ tạo thành ion phức:



Dấu ⁑ chỉ cặp electron của ligan Cl tạo liên kết phối trí với ion Mn^{2+}.

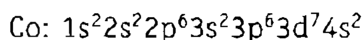
Qua sơ đồ trên ta thấy trong phức chất còn 5 electron độc thân, nó là chất thuận từ. Điều đó phù hợp với thực tế.

b) Sự tạo thành phức $[Co(NH_3)_6]^{3+}$ (hexamino coban (III))

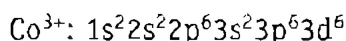
Thực nghiệm cho biết phức này là chất nghịch từ (tất cả các electron đã ghép đôi).

Sự tạo thành phức $[Co(NH_3)_6]^{2+}$ được mô tả như sau:

– Cấu hình electron của nguyên tử Co và ion Co^{3+}

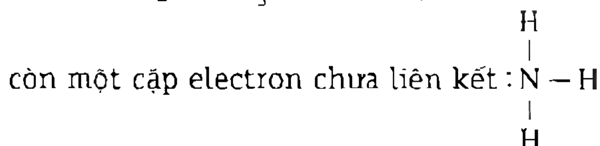


$$Co:\ 1s^22s^22p^63s^23p^63d^74s^2$$



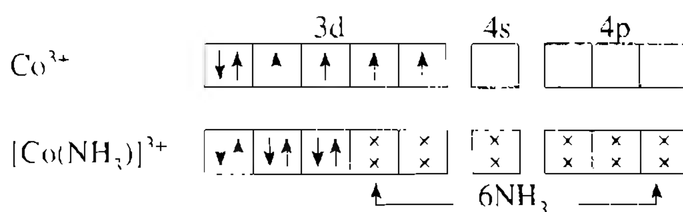
$$Co^{3+}:\ 1s^22s^22p^63s^23p^63d^6$$

– Các ligan NH_3, sau khi tạo thành liên kết cộng hoá trị với ba nguyên tử hiđro,



Như vậy, mỗi ligan NH_3 chuyển một cặp electron chưa liên kết cho ion kim loại trung tâm Co^{3+}. Để nhận 6 cặp electron của các ligan, ion kim loại phải có 6 obitan trống; mặt khác, vì là chất nghịch từ, nó không chứa electron độc thân.

Dưới đây là sơ đồ tạo thành ion phức $[Co(NH_3)]^{3+}$:



Qua sơ đồ trên ta thấy, trong ion phức không có electron độc thân, nó là chất nghịch từ, điều đó phù hợp với thực tế.

CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP

2.1. a) Trong hệ thống tuần hoàn, nếu xếp các nguyên tố theo chiều tăng dần của khối lượng nguyên tử thì sẽ gặp những khó khăn gì?

b) Khi thay đổi khối lượng nguyên tử bằng điện tích hạt nhân thì sẽ giải quyết được nhưng khó khăn trên như thế nào?

2.2. Liệu có thể tìm ra một phản ứng để chứng tỏ rằng đã tìm ra một nguyên tố mới nằm giữa thiếc và antimon trong hệ thống tuần hoàn hay không?

2.3. Số lượng tử nào chỉ liên hệ với electron? Các số lượng tử nào mô tả obitan?

2.4. Trong các bộ gồm bốn số lượng tử sau đây,

– Bộ nào mô tả lớp electron ngoài cùng của nguyên tử?

– Bộ nào không tuân theo các quy tắc về quan hệ giữa các số lượng tử?

Electron	n	l	m_l	m_s
a) Thứ nhất	1	1	1	$\frac{1}{2}$
Thứ hai	1	1	1	$-\frac{1}{2}$
b) Thứ nhất	2	0	0	$+\frac{1}{2}$
Thứ hai	2	0	0	$-\frac{1}{2}$
Thứ ba	2	1	−1	$+\frac{1}{2}$
Thứ tư	2	1	−1	$+\frac{1}{2}$
c) Thứ nhất	2	0	0	$+\frac{1}{2}$
Thứ hai	2	0	0	$-\frac{1}{2}$

2.5. Giải thích ngắn gọn tại sao mỗi bộ số lượng tử sau không đúng quy định đối với một electron của nguyên tử oxi.

Trong mỗi trường hợp, hãy thay đổi các hoá trị cho thích hợp.

a) $n = 2, l = 2, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$ b) $n = 2, l = 1, m_l = -1, m_s = 0$

c) $n = 4, l = 2, m_l = 0, m_s = 0$ d) $n = 2, l = 1, m_l = -3, m_s = -\frac{1}{2}$

2.6. Xét xem trong các bộ bốn số lượng tử sau đây, bộ nào không đúng quy định? Cần thay đổi thế nào cho đúng?

	n	l	m_l	m_s
a)	2	0	0	$-\frac{1}{2}$
b)	1	1	0	$-\frac{1}{2}$
c)	2	1	−1	$\frac{1}{2}$
d)	6	5	5	$-\frac{1}{2}$

2.7. Viết đầy đủ bốn số lượng tử đối với mỗi electron nằm bên ngoài vỏ khí trơ (khí hiếm) agon đối với nguyên tố scandi. (Sc: $[Ar]3d^1 4s^2$).

2.8. Một trong những trạng thái kích thích có khả năng xảy ra đối với nguyên tố hiđro là electron nằm ở obitan 4p. Viết tất cả các bộ số lượng tử co thể có đối với electron đó.

2.9. Diễn đạt quy tắc Hund bằng ngôn từ của anh (chị) và áp dụng vào việc viết cấu hình electron của N, C theo các obitan.

2.10. Giả định là chúng ta bị lạc vào một thế giới khác, ở đó quan hệ giữa các số lượng tử cũng được quy định như ở chúng ta, chỉ khác một điều là số lượng tử phụ l là một số nguyên có các giá trị từ 0 đến n. Hỏi số hiệu nguyên tử của hai khí hiếm nhẹ nhất trong thế giới đó là bao nhiêu?

2.11. Có bao nhiêu electron chưa ghép đôi trong nguyên tử ở trạng thái cơ bản trong mỗi nhóm sau:

a) IIA, VA, VIIIA, IIA; b) IVA, VIIA, IA, VIA.

2.12. Paladi (Pa, Z = 26) có tính nghịch từ.

Xét xem trong số 3 cấu hình electron sau, cấu hình nào phù hợp với tính chất đó?

a) $[Kr]\ 5s^2 4d^8$ b) $[Kr]\ 4d^{10}$ c) $[Kr]\ 5s^1 4d^9$.

2.13. Viết cấu hình electron của các nguyên tố sau:

a) Stronti (Sr) mang tên một thành phố ở Scôtlen.

b) Ziriconi (Zr) một kim loại có khả năng chống rỉ đặc biệt và có nhiều ứng dụng trong công nghiệp. Các khoáng chất trên Mặt Trăng có hàm lượng Zr lớn bất ngờ so với các khoáng chất có chứa Zr trên Mặt Đất!

c) Rhođi (Rh) dùng làm đồ trang sức và làm chất xúc tác trong công nghiệp.

d) Thiếc được dùng từ thời cổ, hợp kim của thiếc rất phổ biến.

2.14. Hãy diễn đạt định luật tuần hoàn theo câu chữ của anh (chị) và giải thích mối quan hệ đó với cấu hình electron.

2.15.a) Có thể dựa vào tính chất hoá học của các nguyên tố để xây dựng hệ thống tuần hoàn không? Trình bày ngắn gọn làm như thế nào.

b) Có thể dựa vào cấu hình electron của các nguyên tố để xây dựng không? Trình bày ngắn gọn xây dựng như thế nào?

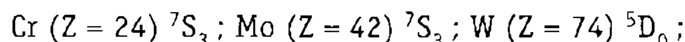
2.16. So sánh các định nghĩa về chu kì, nhóm, phân nhóm trình bày trong phần 1 và phần 2. Các định nghĩa đó liên quan đến nhau như thế nào?

2.17. Trong hệ thống tuần hoàn có bao nhiêu chu kì? Bao nhiêu nhóm? Dựa vào đâu để xác định số chu kì, số nhóm?

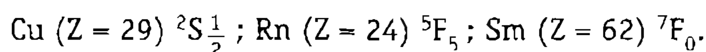
2.18. Dựa vào đâu để xác định số nguyên tố trong mỗi chu kì? (xét tất cả các chu kì).

2.19. Hãy nêu nguyên nhân của sự biến đổi tuần hoàn tính chất các nguyên tố khi điện tích hạt nhân tăng dần.

2.20. a) Viết cấu hình electron của các nguyên tố sau: (dựa theo số hạng quang phổ nguyên tử viết kèm theo)



$$Cr\ (Z = 24)\ ^7S_3\ ;\ Mo\ (Z = 42)\ ^7S_3\ ;\ W\ (Z = 74)\ ^5D_0\ ;$$



$$Cu\ (Z = 29)\ ^2S_{\frac{1}{2}}\ ;\ Rn\ (Z = 24)\ ^5F_5\ ;\ Sm\ (Z = 62)\ ^7F_0.$$

b) Dựa vào cấu hình electron, hãy xác định vị trí của các nguyên tố đó trong bảng tuần hoàn (chu kì, nhóm A, nhóm B).

c) Xác định tính chất hoá học cơ bản của các nguyên tố đó.

2.21. Viết cấu hình electron của các nguyên tố thuộc nhóm VIA, chu kì 3; nguyên tố nhóm VII thuộc chu kì 4 (không dùng bảng tuần hoàn).

2.22. Vì sao lại xếp các nguyên tố Cu, Ag, Au vào cùng nhóm I với các kim loại kiềm? Tại sao xếp Mn, Te, Re vào nhóm VII với các halogen? Các nguyên tố của các nhóm A, B (cùng số nhóm) có mối liên hệ gì?

2.23. Trong hệ thống tuần hoàn, các kim loại nằm ở khu vực nào? các phi kim nằm ở khu vực nào?

Viết cấu hình electron của nhóm kim loại mạnh nhất. Của nhóm phi kim mạnh nhất. Của kim loại mạnh nhất. Của phi kim mạnh nhất. Vì sao lại viết như vậy?

2.24. Dựa vào cấu hình electron, người ta có thể chia các nguyên tố thành mấy loại? Viết cấu hình electron chung cho mỗi loại. Nêu tính chất chung của mỗi loại.

2.25. Dựa vào cấu hình electron, viết phương trình phản ứng tạo thành các ion sau và dự đoán từ tính của chúng (thuận từ hay nghịch từ):

a) $_{25}Mn^{2+}$; b) $_{24}Cr^{3+}$; c) $_{80}Hg^{2+}$; d) $_{23}V^{3+}$; e) $_{28}Ni^{2+}$; g) $_{57}La^{3+}$.

2.26. Một chất có màu vì nó chỉ hấp thụ một bước sóng của ánh sáng nhìn thấy. Ánh sáng hấp thụ đó kích thích các electron nhảy lên các obitan chưa đầy đủ.

a) Vì sao nhiều muối của nguyên tố chuyển tiếp có màu trong khi đó thì hầu như muối của các nguyên tố nhóm A không màu?

b) Hiệu năng lượng giữa phân lớp 5d và 6s trong nguyên tử vàng có liên quan đến màu vàng của kim loại đó. Biết rằng hiệu năng lượng đó vào khoảng 2,7eV ($1eV = 1,602 \times 10^{-19}J$). Giải thích tại sao vàng lại có màu đặc trưng đó?

2.27. Các lantanit hay đất hiếm chỉ còn là "nguyên tố hiếm vừa". Viết cấu hình electron của các nguyên tố sau:

a) Europi, Eu là nguyên tố đắt nhất trong số các nguyên tố đất hiếm. Giá mỗi gam europi từ 50 đến 100$ Mỹ (Eu: $^8S_{7/2}$).

b) Ytecbi, Y, tên một làng ở Thuỵ Điển, nơi đầu tiên tìm thấy nguyên tố này, giá rẻ hơn europi, chỉ 15$ Mỹ/gam. (Yb: $^1S_0$).

2.28. Viết cấu hình electron của các actini sau:

a) Amerixi, Am (Z = 95) là một nguyên tố nhân tạo, được dùng để phát hiện khói trong nhà (số hạng quang phổ là $^8S_{7/2}$).

b) Plutoni, Pu (Z = 94) là một trong những chất phóng xạ nguy hiểm nhất vì tốc độ nhanh và phóng ra hạt α. Được dùng để chế tạo vũ khí hạt nhân (số hạng quang phổ là $^7F_0$).

c) Einsteini, Es (Z = 99), nguyên tố này mang tên nhà bác học thiên tài Einstein (số hạng quang phổ là $^4I_{15/2}$).

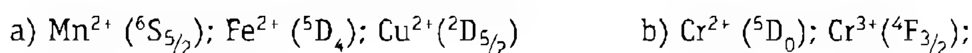
2.29. Dựa vào cấu hình electron, hãy giải thích độ bền của các ion lantanit sau: Ce^{4+} và Eu^{2+}.

2.30. Những ion nào sau đây thuận từ?

a) Mo^{3+}; Au^{+}; Mn^{2+}; Hf^{2+};

b) V^{3+}; Cd^{3+}; Co^{3+}; Ag^{+}.

2.31. Dựa vào số hạng quang phổ, hãy viết cấu hình electron của các ion sau:



a) Mn^{2+} ($^6S_{5/2}$); Fe^{2+} ($^5D_4$); Cu^{2+}($^2D_{5/2}$)

b) Cr^{2+} ($^5D_0$); Cr^{3+}($^4F_{3/2}$);



c) V^{2+}($^4F_{3/2}$); V^{3+}($^3F_2$);

d) Co^{2+} ($^4F_{9/2}$); Co^{3+} ($^5D_0$).

Dựa theo kết quả trên hãy cho nhận xét: Đối với các nguyên tố chuyển tiếp, khi ion hoá, các electron ns bị tách ra trước hay các electron (n–1)d?

2.32. Không nhìn vào bảng tuần hoàn, hãy xác định số hiệu nguyên tử của tất cả các khí hiếm, biết rằng trừ heli ra, tất cả khí hiếm khác đều có cấu hình lớp electron hoá trị là ns^2np^6.

PHẦN BA

SỰ BIẾN ĐỔI TUẦN HOÀN MỘT SỐ TÍNH CHẤT QUAN TRỌNG CỦA NGUYÊN TỬ VÀ ĐƠN CHẤT

"... Rõ ràng là trong sự phát triển của khoa hoc, tương lai sẽ ngày càng có nhiều khả năng tính toán lí thuyết...

Nhưng hoá học không thể quy về vật lí học. Hoá học có hàng loạt quy luật chỉ đạc trưng cho nó; trong số đó định luật tuần hoàn là quan trọng nhất..."

Karapêchian, 1957 (Nga)

Tuỳ theo sự biến đổi tính chất của các nguyên tố theo chiều tăng của điện tích hạt nhân, có thể chia chúng thành hai loại:

- Những tính chất biến đổi không tuần hoàn.
- Những tính chất biến đổi tuần hoàn.

Những tính chất biến đổi không tuần hoàn :

Những tính chất này phụ thuộc một cách đơn điệu vào điện tích hạt nhân. Chúng không phụ thuộc trực tiếp vào cấu hình electron của nguyên tử nguyên tố đó.

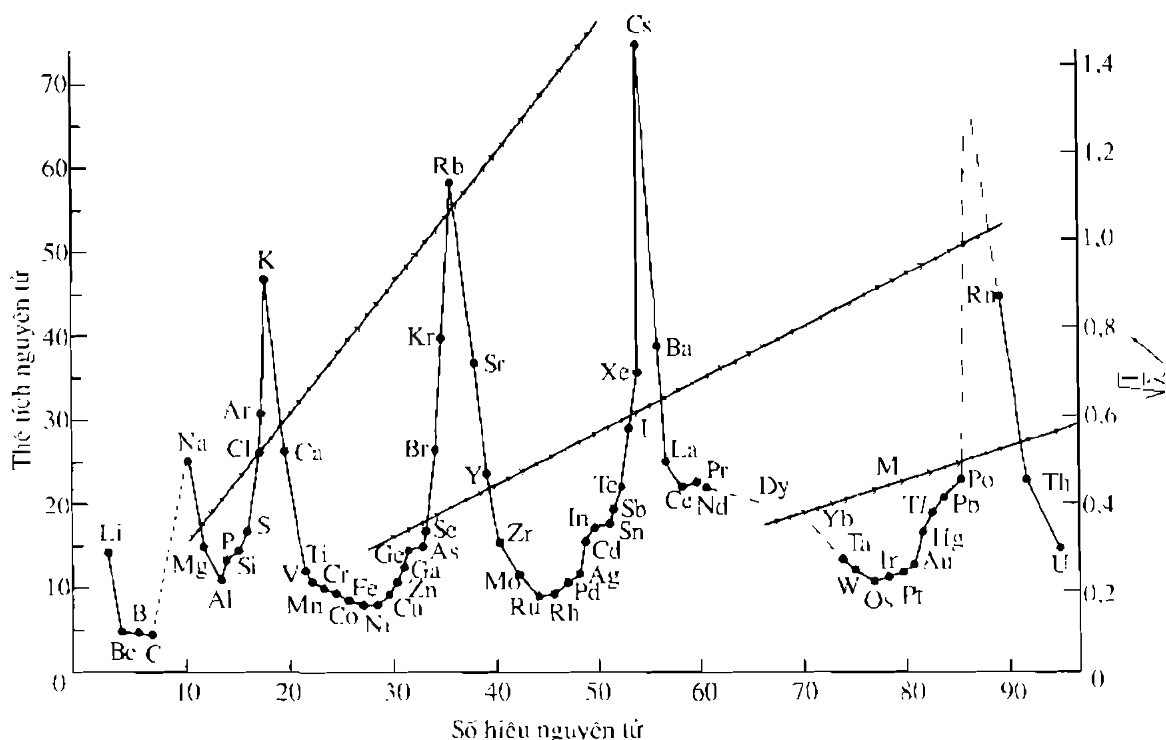
Loại tính chất này không nhiều, ta có thể kể:

- Sự biến đổi số sóng của quang phổ tia X của các nguyên tố.
- Khối lượng nguyên tử.
- Nhiệt dung nguyên tử.

Những tính chất biến đổi tuần hoàn :

Những tính chất này phụ thuộc trực tiếp vào cấu hình electron, đặc biệt là các lớp electron bên ngoài.

Loại tính chất này bao gồm các tính chất hoá học và một số lớn tính chất vật lí của các nguyên tố và càng ngày người ta càng phát hiện ra thêm nhiều tính chất biến đổi tuần hoàn mới.



Hình 3.1. Ví dụ về sự biến đổi tuần hoàn và không tuần hoàn

– *Sự phụ thuộc tuyến tính* giữa căn bậc hai của số nghịch đảo bước sóng ($\sqrt{\frac{1}{\lambda}}$) của quang phổ tia X (đối với dãy K, L, M) và vị trí của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

– *Sự phụ thuộc tuần hoàn* giữa thể tích nguyên tử ($\frac{\text{khối lượng nguyên tử}}{\text{khối lượng riêng}}$) cm^3 và vị trí của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

Sau đây là một số tính chất biến đổi tuần hoàn quan trọng:

– *Tính chất của nguyên tử các nguyên tố:*

Bán kính nguyên tử; thể tích nguyên tử; bán kính ion.

Năng lượng ion hoá; ái lực với electron; độ âm điện

Hoá trị; số oxi hoá.

Từ tính; màu sắc.

– *Tính chất của các nguyên tố ở trạng thái tự do (đơn chất)*

Độ cứng; hệ số giãn nở; chiết suất; tỉ khối; nhiệt độ nóng chảy, nhiệt nóng chảy; nhiệt độ sôi; nhiệt bay hơi, nhiệt thăng hoa, nhiệt sonvat hoá của các ion; độ dẫn điện; độ dẫn nhiệt... Các tính chất điện hoá: thế điện cực.

– *Tính chất của hợp chất*

Tính chất axit – bazơ, tính oxi hoá – khử; các tính chất nhiệt động: nhiệt tạo thành các chất, entropi, thế nhiệt động v.v...

Trong số các tính chất kể trên, có một số *tính chất quan trọng nhất* cho phép tiên đoán và giải thích tính chất hoá học của các nguyên tố cũng như quy luật biến đổi những tính chất đó khi điện tích hạt nhân tăng dần. Đó là:

- Sự biến đổi cấu hình electron.
- Bán kính nguyên tử; bán kính ion.
- Năng lượng ion hoá; ái lực với electron; độ âm điện.
- Hoá trị; số oxi hoá.

1. BÁN KÍNH NGUYÊN TỬ. BÁN KÍNH ION

Vì electron có tính chất sóng nên nguyên tử không có giới hạn xác định nghiêm ngặt. Do đó không thể đo được kích thước tuyệt đối của nguyên tử tự do. Người ta thường xác định bán kính của các nguyên tử liên kết với nhau bằng một kiểu liên kết hoá học nhất định. Do đó, ứng với các kiểu liên kết khác nhau, người ta xác định được các bán kính nguyên tử khác nhau và ta nên xem các bán kính này như những đại lượng hiệu dụng (đại lượng thể hiện trong thực tế).

Người ta xác định bán kính hiệu dụng khi nghiên cứu cấu tạo phân tử và tinh thể.

1.1. Bán kính nguyên tử

1.1.1. Bán kính cộng hoá trị

Bán kính cộng hoá trị của một nguyên tử bằng nửa khoảng cách giữa hạt nhân hai nguyên tử của cùng một nguyên tố tạo thành liên kết cộng hoá trị đơn (trong các đơn chất khí hay rắn).

Chẳng hạn, khoảng cach giưa các hạt nhân trong phân tử hidro (H_2, H – H) là 0,74 Å, do đó bán kính cộng hoá trị của hiđro được coi bằng một nửa khoảng cách đó tức là 0,37Å.

Khoảng cách giữa các hạt nhân trong phân tử Cl_2 (Cl – Cl) là 1,988 Å, do đó bán kinh cộng hoá trị của clo bằng 0,99 Å.

Bán kính nguyên tử cacbon trong kim cương và trong một số lớn hợp chất vô cơ (có liên kết đơn C – C) là 0,77Å và của silic (Si – Si) là 1,17Å.

Khi nghiên cứu độ dài của liên kết cộng hoá trị, người ta thấy bán kính cộng hoa trị có *tính chất cộng tính*: khoảng cách giữa hai nguyên tử A – B bằng trung bình cộng khoảng cách giữa A – A và B – B.

Chẳng hạn, độ dài liên kết đơn C – Si được xác định bằng thực nghiệm là 1,94 Å trùng hợp tốt với kết quả tính toán :

$$d_{C-Si} = r_C + r_{Si} \Rightarrow 1,94\ \text{Å} = 0,77\ \text{Å} + 1,17\ \text{Å}.$$

Việc áp dụng quy tắc cộng tính trong nhiều trường hợp cho những kết quả phù hợp tốt với thực nghiệm.

Bảng 3.1. Độ dài liên kết theo tính toán và thực nghiệm (theo Å)

Liên kết	Bán kính nguyên tử	Độ dài liên kết		Hiệu số
		Tính toán	Thực nghiệm	
C – I	0,77 + 1,35	2,12	2,14	– 0,02
C – Br	0,77 + 1,14	1,91	1,94	– 0,03
C – Cl	0,77 + 1,00	1,77	1,76	+ 0,01
C – F	0,77 + 0,72	1,49	1,36	+ 0,13
Si – I	1,17 + 1,35	2,52	2,44	+ 0,08
Si – Br	1,17 + 1,14	2,31	2,16	+ 0,15
Si – Cl	1,17 + 1,00	2,17	2,02	+ 0,15
Si – F	1,17 + 0,72	1,89	1,56	+ 0,33
B – Br	0,85 + 1,14	1,99	1,88	+ 0,11
B – Cl	0,85 + 1,00	1,85	1,72	+ 0,13
B – F	0,85 + 0,72	1,57	1,29	+ 0,28
S – Br	1,04 + 1,14	2,18	2,27	– 0,09
S – Cl	1,04 + 1,00	2,04	1,99	0,05
S – F	1,04 + 0,72	1,76	1,56	+ 0,20
Cl – Br	1,00 + 1,14	2,14	2,14	0,0

Tuy nhiên, trong một số trường hợp có sự sai lệch so với cách xác định trên. Nguyên nhân là do:

– Có sự tạo thành liên kết kép (độ bội của liên kết tăng, bán kính cộng hoá trị giảm).

– Liên kết không phải cộng hoá trị thuần tuý mà có một phần tính chất ion.

– Có sự lai hoá các obitan liên kết; sự lai hoá này quy định dạng hình học của phân tử cộng hoá trị.

Bảng 3.2. Độ dài liên kết và năng lượng liên kết

Liên kết	Độ dài liên kết (Å)	Năng lượng liên kết (kJ/mol)
C – C	1,54	83
C = C	1,34	146
C ≡ C	1,20	200
N – N	1,45	38
N = N	1,24	100
N ≡ N	1,10	226
O – O	1,48	33 (H_2O_2)
O = O	1,21	118 (O_2)
O ≡ O	1,12 (O_2^+)	–
C – N	1,47	73
C = N	1,34	147
C ≡ N	1,14 (CN^-)	213
C – O	1,43	84
C = O	1,22	177
C ≡ O	1,13 (CO)	256
C – S	1,81 (C_2H_5SH)	65
C = S	1,55 (CS_2)	128
N – O	1,36	–
N = O	1,22	–
N ≡ O	1,06	–

Sự sai lệch với cộng tính càng lớn nếu các nguyên tử liên kết với nhau *có độ âm điện càng khác xa nhau*. Vì tính chất của liên kết phụ thuộc nhiều vào hiệu số độ âm điện nên tính chất ion của liên kết là nguyên nhân gây nên sự sai lệch như ở trên đã xét.

Để thể hiện một phần tính chất ion của liên kết V. Schomaker (Sômâycơ) và D. Stevenson (Stivensơn) đề nghị một phương trình kinh nghiệm để xác định bán kính cộng hoá trị

$r_{AB} = r_A + r_B - 0,09(\chi_A - \chi_B)$

Trong đó, χ_A và χ_B là độ âm điện của nguyên tố A và nguyên tố B theo thang Pauling.

Phương pháp trên tuy không có cơ sở lí thuyết nhưng cũng góp phần hoàn thiện phương pháp xác định bán kính cộng hoá trị.

1.1.2. Bán kính kim loại

Bán kính kim loại được xác định bằng nửa khoảng cách giữa các hạt nhân nguyên tử nằm cạnh nhau trong tinh thể kim loại.

1.1.3. Bán kính Van de Van

Là bán kính của các nguyên tử không liên kết. Chúng được xác định theo khoảng cách giữa các nguyên tử trong chất rắn hay chất lỏng, trong đó các nguyên tử nằm trực tiếp bên nhau nhưng không liên kết với nhau bằng liên kết cộng hoá trị, liên kết ion hay liên kết kim loại. Chẳng hạn, bán kính của các khí hiếm.

Trong các loại bán kính kể trên thì bán kính cộng hoá trị của các phi kim và bán kính kim loại của các kim loại tương ứng một cách gần đúng với bán kính của các nguyên tử trung hoà.

1.1.4. Bán kính xác định bằng phương pháp tính toán lí thuyết

Các phương pháp xác định bán kính nguyên tử kể trên đều dựa vào thực nghiệm đo khoảng cách giữa các hạt nhân nguyên tử của các nguyên tử khác nhau.

Về mặt tính toán lí thuyết, dựa vào cơ lượng tử, người ta đã rút ra biểu thức xác định bán kính nguyên tử của một nguyên tố như sau:

$$r_{\text{nguyên tử}} = \frac{\alpha n^2}{Z - \sigma}$$

r (bán kính nguyên tử) là khoảng cách từ hạt nhân đến chỗ electron có mật độ lớn nhất.

α là một hằng số.

n là số lượng tử chính đối với lớp electron bên ngoài.

σ là hằng số chắn (sẽ nói kĩ hơn trong phần "Năng lượng ion hoá").

Các giá trị bán kính nguyên tử xác định theo lí thuyết chưa phù hợp tốt với các giá trị thực nghiệm. Tuy vậy, qua phương pháp trên, ta cũng thấy được những yếu tố ảnh hưởng đến sự biến đổi bán kính của các nguyên tử.

Bảng sau đây ghi bán kính nguyên tử của các nguyên tố thuộc các nhóm A (độ dài tính theo picomet pm = 10^{-12}m hoặc tính theo angstrom Å, 1 Å = 100 pm).

Bảng 3.3. Bán kính nguyên tử của các nguyên tố nhóm A (Å)

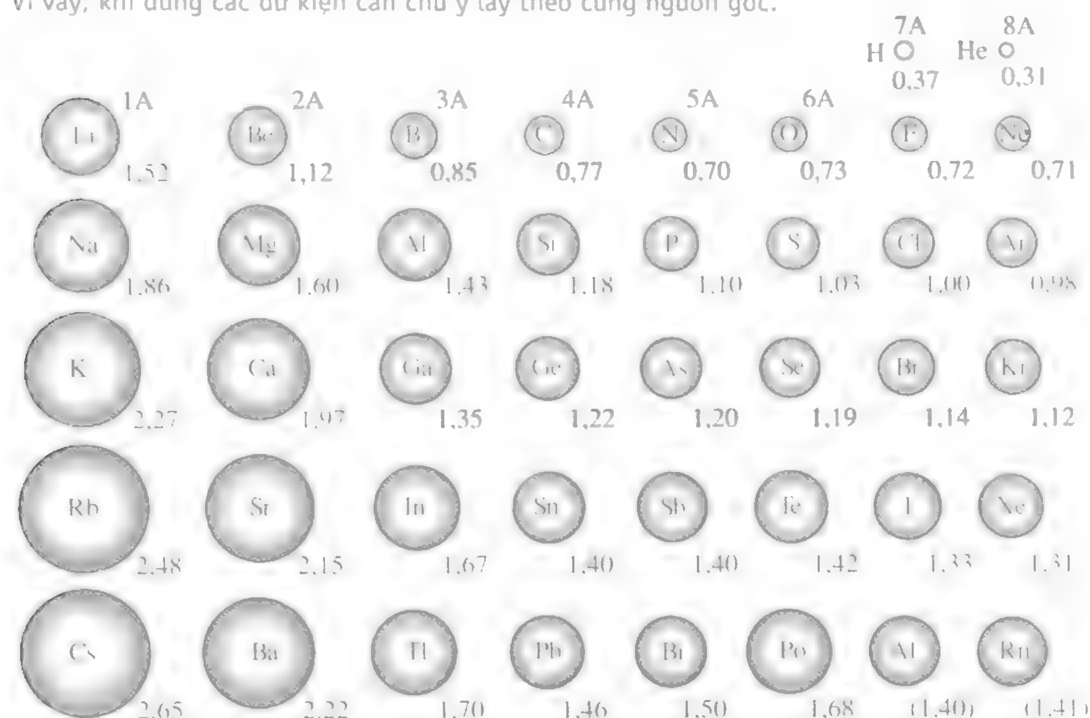
IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
						H 0,37	He 0,31
Li 1,52	Be 1,12	B 0,85	C 0,77	N 0,70	O 0,73	F 0,72	Ne 0,72
Na 1,86	Mg 1,60	Al 1,43	Si 1,18	P 1,10	S 1,03	Cl 1,00	Ar 0,98
K 2,27	Ca 1,97	Ga 1,35	Ge 1,22	As 1,20	Se 1,19	Br 1,14	Kr 1,12
Rb 2,48	Sr 2,15	In 1,67	Sn 1,40	Sb 1,40	Te 1,42	I 1,33	Xe 1,31
Cs 2,65	Ba 2,22	Tl 1,70	Pb 1,46	Bi 1,50	Po 1,68	At (1,40)	Rn (1,41)

– Các dữ kiện về bán kính nguyên tử của các nguyên tố ghi trong bảng trên được trích trong tạp chí Journal of Education, Pergamon Press, Oxford, 1984.

– Các dữ kiện trích theo các nguồn gốc khác nhau có thể rất khác nhau.

Ví dụ, bán kính của nguyên tử nitơ có thể có các giá trị từ 0,50 Å (50 pm) cho đến 0,92 Å (92 pm), bán kính của nguyên tử oxi – có thể có giá trị từ 0,60 Å (60 pm) đến 0,73 Å (73 pm).

Vì vậy, khi dùng các dữ kiện cần chú ý lấy theo cùng nguồn gốc.



Hình 3.2. Sự biến đổi bán kính nguyên tử của các nguyên tố

1.1.5. Sự biến đổi bán kính nguyên tử của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn

– *Trong một chu kì* (xem hình 3.1)

Bán kính nguyên tử của các nguyên tố giảm dần từ trái qua phải. Sở dĩ như vậy là vì:

Theo công thức tính bán kính nguyên tử ở trên :

$$r = \frac{\alpha n^2}{Z - \sigma}$$

Trong một chu kì, n có giá trị như nhau $\alpha n^2 = C_n$ là một hằng số; σ là hằng số chắn (sẽ nói kĩ ở phần sau), nói chung ($Z - \sigma$) tăng khi Z tăng, vì vậy khi Z tăng, r giảm. Nói khác đi, trong một chu kì, số lớp electron của các nguyên tử như nhau, khi đi từ nguyên tố nọ đến nguyên tố kia, điện tích hạt nhân tăng lên một đơn vị (nói chung σ tăng kém một đơn vị). Kết quả là electron bị hút về phía hạt nhân mạnh hơn làm cho bán kính nguyên tử giảm đi.

Đối với các nguyên tố họ d, sự thay đổi có chậm hơn, đặc biệt là đối với họ sắt, ví dụ Fe (1,26 Å), Co (1,25 Å), Ni (1,24 Å).

Đối với các nguyên tố họ Lantan và Actini thì sự thay đổi còn chậm hơn nữa. Từ nguyên tố số 58 là ceri (1,83 Å) đến nguyên tố số 71 là luteci (1,74 Å), qua 14 nguyên tố mà bán kính nguyên tử chỉ thay đổi có 0,09 Å.

Đó là vì ở các nguyên tố này, electron tăng thêm được điền vào lớp electron đang xây dựng dở ở sâu bên trong (lớp thứ hai và lớp thứ ba kể từ ngoài vào) nên ít ảnh hưởng đến kích thước nguyên tử.

(Sở dĩ như vậy là do hằng số chắn σ của các electron s lớn hơn σ của các electron p; σ của các electron d lớn hơn của các electron f: $\sigma_s > \sigma_p > \sigma_d > \sigma_f$, vì vậy mà khi Z tăng lên một đơn vị, ($Z - \sigma$) cũng tăng gần một đơn vị làm cho r không giảm bao nhiêu.)

Trong một nhóm (xem hình 3.1)

Đối với các nguyên tố nhóm A

Bán kính nguyên tử của các nguyên tố tăng từ trên xuống dưới khi điện tích hạt nhân tăng lên chủ yếu là do số lớp electron tăng lên. Trong công thức

$$r = \frac{\alpha n^2}{Z - \sigma}$$

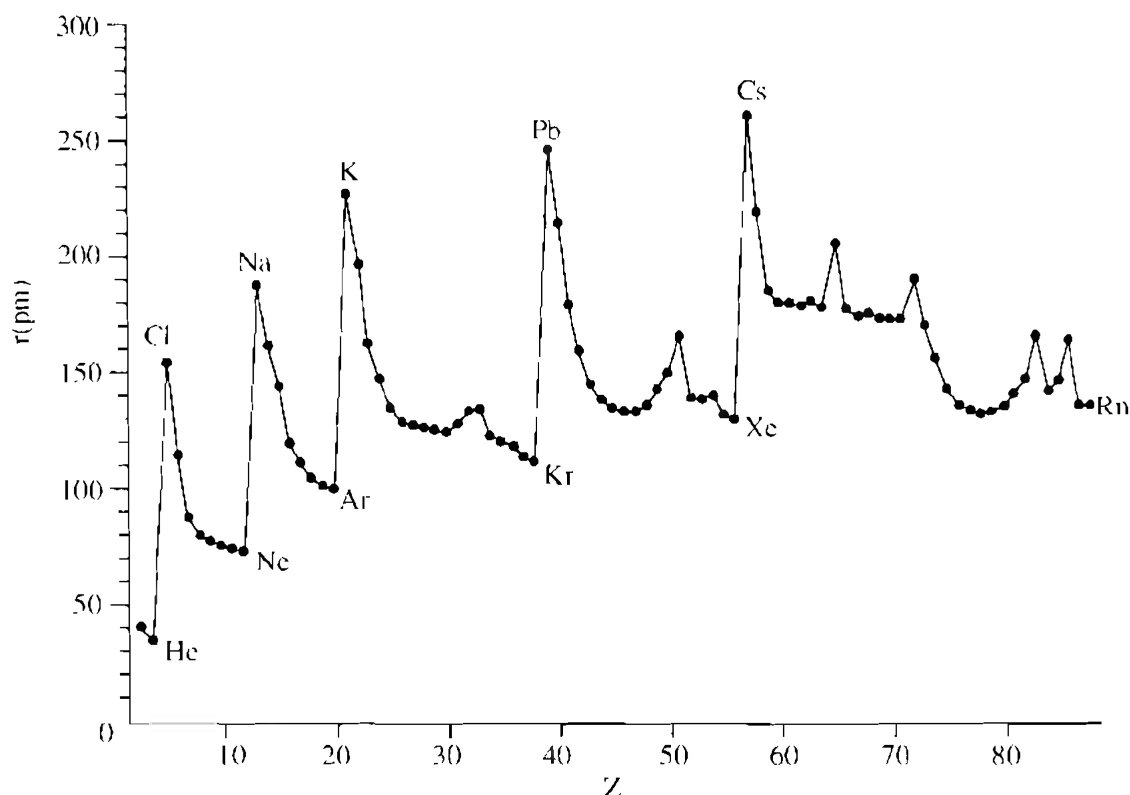
r tỉ lệ với n^2.

Sự tăng tương đối lớn nhất là đối với hai nguyên tố nhẹ nhất trong nhóm và tăng ít nhất là đối với hai nguyên tố nặng nhất trong nhóm.

– *Đối với các nguyên tố nhóm B*

Khi chuyển từ nguyên tố đầu nhóm đến nguyên tố thứ hai, bán kính có tăng lên; từ nguyên tố thứ hai đến nguyên tố thứ ba, bán kính ít thay đổi (có khi không đổi hoặc giảm đi chút ít).

Khi thêm vào nguyên tử các electron d và f (những electron có khả năng chắn yếu (có σ nhỏ)) là nguyên nhân chủ yếu làm cho kích thước của các nguyên tử cuối nhóm tăng không đáng kể.



Hình 3.3. Đồ thị biểu diễn sự biến đổi bán kính nguyên tử của các nguyên tố theo chiều tăng của điện tích hạt nhân

1.2. Bán kính ion

Việc xác định bán kính ion phức tạp hơn là xác định bán kính nguyên tử. Thực nghiệm chỉ cho biết khoảng cách giữa hạt nhân các ion chứ không cho biết tỉ lệ bán kính của chúng.

– *Xác minh sự có mặt của ion có trong tinh thể:*

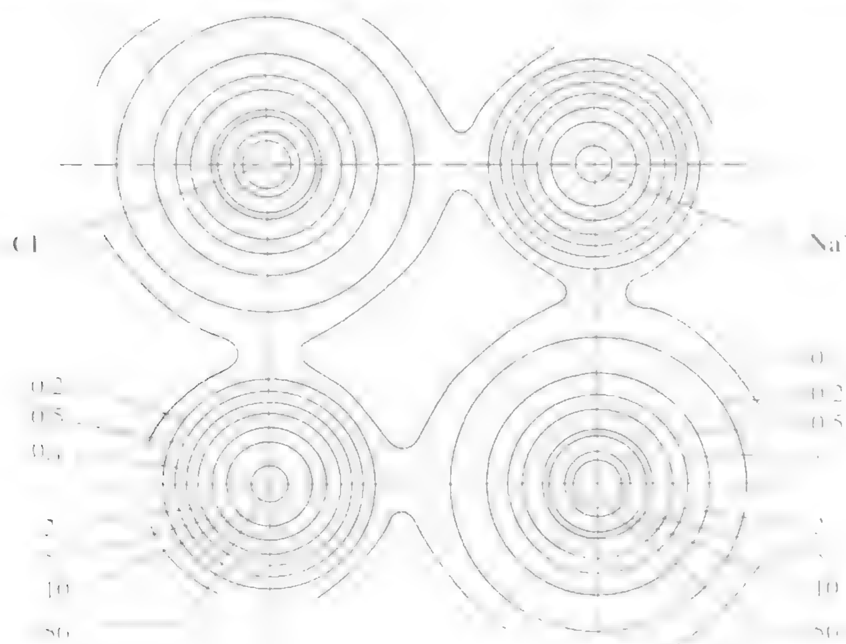
Có hai cách xác minh sự có mặt của ion trong tinh thể rắn:

– *Một cách gián tiếp,* ta biết được sự có mặt của các ion trong tinh thể chất rắn là sự dẫn điện của các muối nóng chảy và của dung dịch muối. Kết qua tính toán năng lượng mạng lưới tinh thể ion rất tốt.

– *Một cách trực tiếp,* ta có thể xác minh sự có mặt của các ion dựa vào bản đồ mật độ phân bố electron thu được bằng phương pháp phân tích rontgen (ronghen).

Bản đồ này chẳng những cho biết vị trí tương đối của hạt nhân mà còn cho biết mật độ electron xung quanh hạt nhân.

Hình vẽ sau đây trình bày bản đồ đường mức mật độ electron (số electron trong $Å^{-3}$) đối với NaCl (mỗi đường nối các điểm có mật độ electron bằng nhau).



Hình 3.4. Bản đồ mật độ electron dọc theo mặt bên mạng lập phương của natri clorua

Ta thấy mật độ điện tích electron giảm dần khi xa hạt nhân, ở vòng ngoài cùng chỉ còn 0,1 và ở vùng giữa các hạt nhân là những đại lượng còn nhỏ hơn.

Nếu lấy tích phân mật độ điện tích electron xung quanh hạt nhân theo toàn thể tích bắt đầu từ một nơi bất kì có mật độ điện tích nhỏ nhất thì quanh hạt nhân nguyên tử natri tổng điện tích bằng 10,05 electron, còn đối với hạt nhân nguyên tử clo nó sẽ bằng 17,70 electron. Điều đó đã chứng minh trực tiếp có sự chuyển dời electron khi tạo thành ion Na^+ (10 electron) và Cl^- (18 electron). Có khoảng 0,25 điện tích electron trong không gian giữa các hạt nhân.

Khu vực mật độ điện tích nhỏ nhất có thể coi là ranh giới xác định giữa hai ion hình cầu chứa phần lớn điện tích.

Nhờ bản đồ mật độ electron, người ta đã xác định được bán kính của cation và anion (theo Å) trong các hợp chất sau:

Hợp chất	r_{cation}	r_{anion}
NaCl	1,18	1,64
KCl	1,45	1,70

Hợp chất	r_{cation}	r_{anion}
CaF_2	1,26	1,10
MgO	1,02	1,09
CuCl	1,10	1,25
CuBr	1,10	1,36
NiO	0,94	1,15

Tiếc rằng bằng phương pháp trên, người ta mới chỉ xác định được bán kính ion trong một số ít tinh thể.

Ngày nay, trên thực tế người ta thường dùng hệ bán kính ion xác định theo Goldsmith (Gônsmit) hoặc hệ bán kính theo Pauling. Các giá trị đó cũng gần nhau.

1.2.1. Hệ Goldsmith (hệ kinh nghiệm)

Từ năm 1920, Landé (Lan-đê) là người đầu tiên đã xác định bán kính của các ion khi giả định rằng trong tinh thể liti halogenua, các ion halogen nằm tiếp xúc với nhau.

Đến năm 1926, Goldsmith dựa vào các dữ kiện thực nghiệm, đặc biệt là trong tinh thể học, đã xác định được bán kính của ion florua và của ion oxit.

$$r_{F^-} = 1{,}33\ \text{Å} \ ; \ r_{O^{2-}} = 1{,}32\ \text{Å}$$

Về sau, Pauling hoàn thiện các dữ kiện của Goldsmith và lấy bán kính của ion oxit O^{2-} $r_{O^{2-}} = 1{,}40$ Å.

Từ các dữ kiện trên, xác định bán kính của các ion khác.

1.2.2. Hệ Pauling (hệ bán kinh nghiệm)

Pauling bắt đầu nghiên cứu khoảng cách giữa các ion của bốn muối halogen kim loại kiềm là NaF, KCl, RbBr và CsI.

Đối với các muối đó có thể coi đa số các yếu tố ảnh hưởng đến kích thước ion là như nhau vì rằng mỗi ion trong tinh thể đều có cùng số electron (đẳng electron), đều mang một điện tích và tỉ lệ bán kính giữa cation và anion đều vào khoảng 0,75.

Pauling cho rằng kích thước của các ion tỉ lệ nghịch với điện tích hiệu dụng của hạt nhân tác dụng đến các electron bên ngoài.

Điện tích hiệu dụng của hạt nhân bằng điện tích hạt nhân Z trừ đi hằng số chắn σ gây nên bởi các electron bên ngoài ion. Hằng số chắn σ được Pauling xác định bằng lí thuyết và bằng các giá trị của số hạng quang phổ rơnghen.

Như vậy, đối với bán kính của hàng loạt ion đẳng electron có thể được mô tả bằng phương trình sau:

$$r_{ion} = \frac{\alpha n^2}{Z - \sigma}$$

α là một hằng số

n là số lượng tử chính đối với lớp electron ngoài cùng.

Đối với bán kính của các ion trong tinh thể muối nêu trên có thể được xác định bởi hệ thống hai phương trình hai ẩn số sau:

Phương trình (1) dựa trên những dữ kiện thực nghiệm:

$r_{cation} + r_{anion} = d$ (khoảng cách giữa hai hạt nhân)

Phương trình (2): $$\frac{r_{cation}}{r_{anion}} = \frac{(Z_{anion} - \sigma)}{(Z_{cation} - \sigma)}$$

Chẳng hạn giải hệ hai phương trình trên để xác định bán kính của Na^+ và F^- trong tinh thể NaF.

Với Na^+ và F^- đều có cấu hình electron $1s^22s^22p^6$, do đó n, α, σ như nhau chỉ khác Z.

$r_{Na^+} + r_{F^-} = 2,31$ Å (thực nghiệm)

$r_{F^-} = 2,31 - r_{Na^+} = \dfrac{\alpha n^2}{9 - 4,15}$ (a)

$r_{Na^+} = \dfrac{\alpha n^2}{11 - 4,15}$ (b)

chia (a) cho (b) được $r_{Na^+} = 0,95$ Å

Giải hệ phương trình trên với các tinh thể muối còn lại ta được :

Ion	Na^+	K^+	Rb^+	Cs^+	F^-	Cl^-	Br^-	I^-
r(Å)	0,95	1,33	1,48	1,69	1,36	1,81	1,95	2,16.

Bảng 3.4 Bán kính của một số ion thường gặp (theo Å)

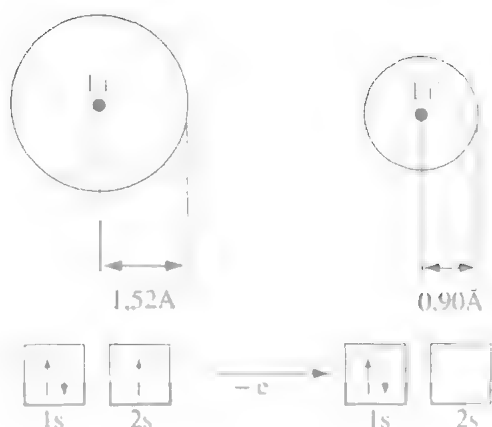
Li^+ 0,90	Be^{2+} 0,59		N^{3-} 1,71	O^{2-} 1,26	F^- 1,19
Na^+ 1,16	Mg^{2+} 0,86	Al^{3+} 0,68		S^{2-} 1,70	Cl^- 1,67
K^+ 1,52	Ca^{2+} 1,14	Ga^{3+} 0,76		Se^{2-} 1,84	Br^- 1,82
Rb^+ 1,66	Sr^{2+} 1,32	In^{3+} 0,94		Te^{2-} 2,07	I^- 2,06
Cs^+ 1,81	Ba^{2+} 1,49	Tl^{3+} 1,03			

Ghi chú: Nguồn trích dẫn như phần bán kính nguyên tử.

Cần chú ý rằng các dữ kiện trích theo các nguồn gốc khác nhau có thể rất khác nhau. Phần trên đã nêu sự khác biệt đối với các bán kính nguyên tử. Đối với bán kính ion cũng tương tự. Vì vậy khi dùng các dữ kiện cần chú ý lấy theo cùng nguồn gốc.

Nhìn vào bảng trên ta thấy:

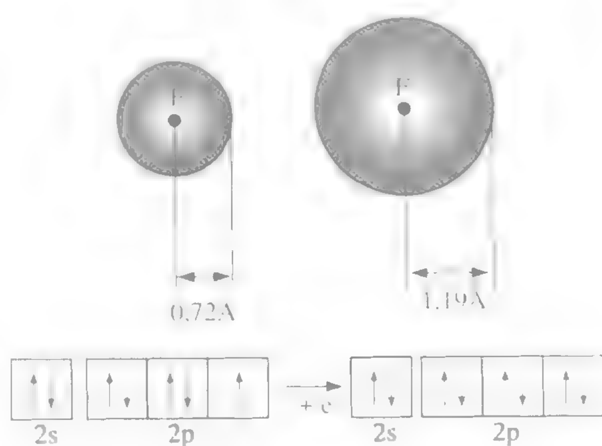
– *Bán kính của ion dương bao giờ cũng nhỏ hơn bán kính của các nguyên tử trung hoà tương ứng.* Ví dụ, bán kính của nguyên tử liti là 1,52 Å, trong khi đó thì bán kính của ion Li^+ chỉ còn là 0,90 Å (hình 3.5).



Hình 3.5. $r_{Li^+} < r_{Li}$

Sở dĩ như vậy là vì khi một electron (hay những electron) bị tách ra khỏi nguyên tử, các electron khác không còn chịu tác dụng của lực đẩy của electron đó, cho nên các electron còn lại bị hút mạnh vào nhân (tác dụng chắn của các electron giảm đi, điện tích hiệu dụng của hạt nhân tăng).

Sự giảm bán kính càng lớn khi electron (hay những electron) bị tách ra làm mất hẳn một lớp electron. Ví dụ đối với nguyên tử liti, khi electron $2s^1$ bị tách ra, lớp thứ hai không còn nữa mà chỉ còn lại lớp thứ nhất.



Hình 3.6. $r_{F^-} > r_F$

Lớp vỏ electron của các cation có cấu hình khí hiếm được liên kết với hạt nhân chặt chẽ hơn làm cho sự biến dạng dưới tác dụng của trường ngoài khó khăn hơn.

Mặt khác, tác dụng phân cực hoá ion tỉ lệ với cường độ điện trường trên bề mặt ion ($E = \frac{(Ze)^2}{r}$, trong đó Z là điện tích của cation). Cho nên ta thấy rằng: cation với điện tích dương lớn và bán kính nhỏ có tác dụng phân cực hoá các anion khác rất mạnh.

– *Bán kính của ion âm bao giờ cũng lớn hơn bán kính của nguyên tử trung hoà tương ứng.*

Khi kết hợp electron vào nguyên tử trung hoà thì bán kính của nó tăng lên nhanh chóng (hình 3.6).

Ví dụ bán kính của nguyên tử clo là 1,00 Å, trong khi đó bán kính của ion clorua (Cl^-) là 1,67 Å ; bán kính của nguyên tử nitơ là 0,70 Å, còn bán kính của ion nitrua (N^{3-}) là 1,71 Å.

Sở dĩ như vậy vì khi kết hợp electron vào nguyên tử thì tác dụng chắn của các electron tăng lên, điện tích hiệu dụng $(Z - \sigma)$ của hạt nhân giảm đi.

Như vậy, mật độ electron trong các anion kém dày đặc hơn là trong các nguyên tử trung hoà tương ứng.

Sau này ta sẽ thấy rằng tác dụng hút của hạt nhân đến lớp vỏ electron yếu đi làm cho anion dễ bị biến dạng hơn khi có tác dụng của điện trường ngoài. Độ biến dạng sẽ càng lớn nếu kích thước và điện tích âm của anion càng lớn.

1.2.3. Các quy luật biến đổi bán kính ion đơn

(1) Đối với các ion có cùng điện tích và lớp vỏ electron có cấu trúc như nhau, nếu số lớp electron càng nhiều thì bán kính càng lớn (sự biến đổi theo cột dọc).

(2) Đối với các ion đẳng electron, bán kính giảm đi khi điện tích hạt nhân tăng.

Bảng bán kính các ion đẳng electron dưới đây xác minh những điều trình bày trên.

Bảng 3.5. Bán kính của các ion đẳng electron (Å)

Lớp ngoài												
$1s^2$			H^- 1,5	He $1,2_8$*	Li^+ 0,68	Be^{2+} 0,35	B^{3+} 0,23	C^{4+} 0,16	N^{5+} 0,13			
$2s^22p^6$	N 1,5*	O^{2-} 1,40	F^- 1,36	Ne $1,3_9$*	Na^+ 0,97	Mg^{2+} 0,67	Al^{3+} 0,52	Si^{4+} 0,42	P^{5+} 0,35	S^{6+} 0,30	Cl^{7+} 0,27	
$2s^22p^63s^2$							P^{3+} 0,44	S^{4+} 0,37	Cl^{5+} 0,33			
$3s^23p^6$	P 1,9*	S^{2-} 1,84	Cl 1,81	Ar $1,7_1$*	K^+ 1,33	Ca^{2+} 0,99	Sc^{3+} 0,81	Ti^{4+} 0,68	V^{5+} 0,59	Cr^{6+} 0,52	Mn^{7+} 0,46	
$3s^23p^63d^{10}$					Cu^+ 0,96	Zn^{2+} 0,74	Ga^{3+} 0,62	Ge^{4+} 0,53	As^{5+} 0,46	Se^{6+} 0,42		
$3s^23p^63d^{10}4s^2$						Ge^{2+} 0,73	As^{3+} 0,58	Se^{4+} 0,50	Br^{5+} 0,47			
$4s^24p^6$	As 2,0*	Se^{2-} 1,98	Br 1,95	Kr $1,8_0$*	Rb^+ 1,47	Sr^{2+} 1,12	Y^{3+} 0,92	Zr^{4+} 0,79	Nb^{5+} 0,69	Mo^{6+} 0,62	Tc^{7+} 0,57	Ru^{8+} 0,5
$4s^24p^64d^{10}$					Ag^+ 1,26	Cd^{2+} 0,97	In^{3+} 0,81	Sn^{4+} 0,71	Sb^{5+} 0,62	Te^{6+} 0,56	I^{7+} 0,50	
$4s^24p^64d^{10}5s^2$						Sn^{3+} 0,93	Sb^{3+} 0,76	Te^{4+} 0,70	I^{5+} 0,62			
$4d^{10}5s^25p^6$	Sb 2,2*	Te^{2-} 2,21	I^- 2,16	Xe 2,0*	Cs^+ 1,67	Ba^{2+} 1,34	La^{3+} 1,14	Ce^{4+} 0,94				

Lớp ngoài												
$4f^7 5s^2 5p^6$						Eu^{2+} 1,09	Gd^{3+} 0,97	Tb^{4+} 0,81				
$4f^{14} 5s^2 5p^6$						Yb^{2+} 0,93	Lu^{3+} 0,85	Hf^{4+} 0,78	Ta^{5+} 0,68	W^{6+} 0,62	Re^{7+} 0,56	Os^{8+} 0,5
$5s^2 5p^6 5d^{10}$					Au^+ 1,37	Hg^{2+} 1,10	Tl^{3+} 0,95	Pb^{4+} 0,84	Bi^{5+} 0,74			
$5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$			Au 2,02		Tl^+ 1,47	Pb^{2+} 1,20	Bi^{3+} 0,93					
$5d^{10} 6s^2 6p^6$		Po^{2-} 2,3	At 2,25	Rn 2,2*	Fr^+ 1,8	Ra^{2+} 1,43	Ac^{3+} 1,18	Th^{4+} 1,02	Pa^{5+} 0,9	U^{6+} 0,80		

Sự biến thiên bán kính ion theo hàng ngang và cột dọc nêu trên được giải thích như sau:

Theo công thức tính bán kính ion: $r_{ion} = \dfrac{\alpha n^2}{Z - \sigma}$

σ: hằng số chắn của các electron

– Trong một chu kì, α là một hằng số, trị số n không đổi, điện tích Z tăng từng đơn vị khi đi từ nguyên tố nọ đến nguyên tố kia, trong khi đó thì hằng số chắn σ (của mỗi electron) giữ hầu như không đổi đối với các ion có cùng cấu hình electron, vì vậy bán kính ion giảm dần.

– Trong một phân nhóm, cả trị số n, Z và σ đều tăng nhưng không thay đổi nhiều, lại thêm n tăng theo bình phương nên bán kính ion tăng.

Sự biến đổi bán kính ion cũng diễn ra tuần hoàn theo chiều tăng của điện tích hạt nhân (xem hình 3.7).

Như trên đã nêu, tuy không thể nói về bán kính nguyên tử, bán kính ion một cách chặt chẽ, các phương pháp xác định bằng lí thuyết và thực nghiệm còn cho những kết quả chưa thật trùng hợp ... nhưng bán kính nguyên tử và bán kính ion vẫn là những đặc trưng quan trọng của các chất.

Bán kính nguyên tử và bán kính ion có liên quan chặt chẽ đến nhiều tính chất khác như năng lượng ion hoá của các nguyên tố, tính axit – bazơ của các hiđroxit, năng lượng mạng lưới ion ... Từ bán kính ion, có thể dự đoán kiểu mạng tinh thể của các hợp chất ion.

Biết được sự biến đổi bán kính nguyên tử và bán kính ion của các nguyên tố, ta còn có thể hiểu được nhiều tính chất quan trọng khác như sự biến đổi tính tan, độ bền đối với nhiệt của các muối ...

a)

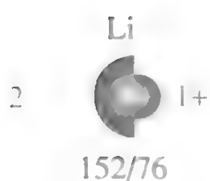
NHÓM

1A (1) 2A (2) 4A (13) 4A (14) 5A (15) 6A (16) 7A (17)

CHU KÌ

2

Li



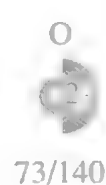
152/76

N



75/146

O



73/140

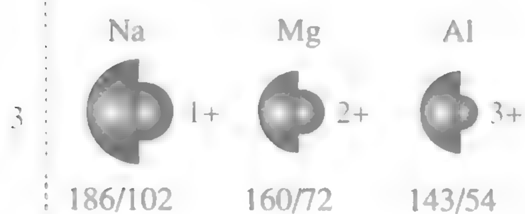
F



72/133

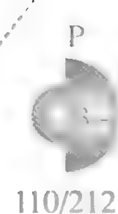
3

Na Mg Al



186/102 160/72 143/54

P



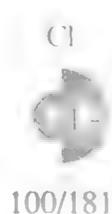
110/212

S



103/184

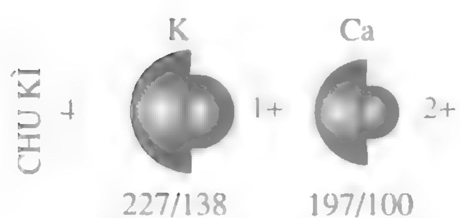
Cl



100/181

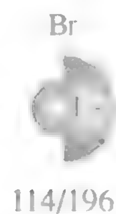
4

K Ca



227/138 197/100

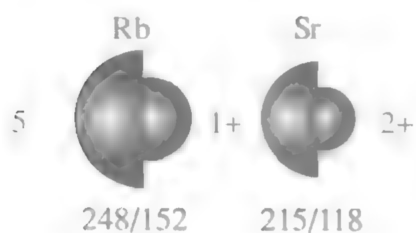
Br



114/196

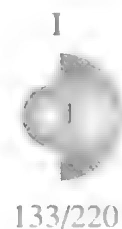
5

Rb Sr



248/152 215/118

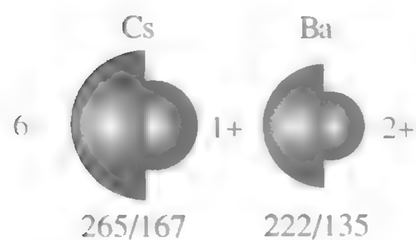
I



133/220

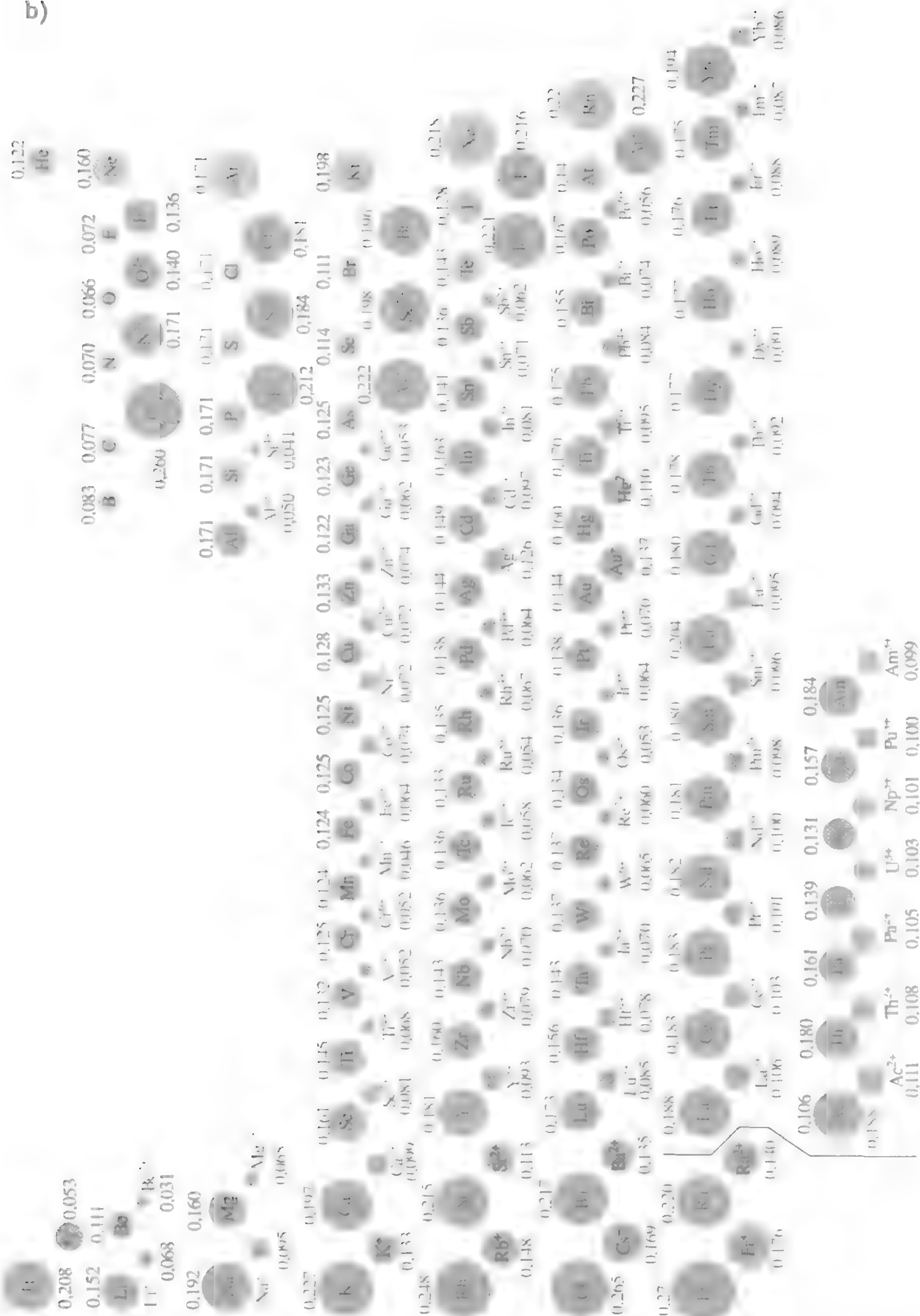
6

Cs Ba



265/167 222/135

b)



Hình 3.7. Mối tương quan giữa bán kính nguyên tử và bán kính ion(cation và anion) (theo pm)

2. NĂNG LƯỢNG ION HOÁ

Năng lượng ion hoá của một nguyên tố (còn gọi là thế ion hoá) là năng lượng cần thiết để tách một electron ra khỏi nguyên tử tự do, ở trạng thái không kích thích.

Chính xác hơn, đó là năng lượng ion hoá thứ nhất (kí hiệu là I_1). Năng lượng ion hoá thứ hai, thứ ba... (I_2, I_3,...) là năng lượng cần thiết để tách electron thứ hai, thứ ba... ra khỏi ion dương có điện tích 1+, 2+... Trong hoá học, I_1 có ý nghĩa quan trọng nhất.

Thường người ta xét năng lượng ion hoá đối với một mol nguyên tử hay ion.

Đó là năng lượng cần thiết để tách hoàn toàn một mol electron ra khỏi nguyên tử (hay ion) ở trạng thái khí.

Năng lượng ion hoá được đo bằng electron von (eV) hoặc kcal/mol hay kJ/mol(1).

Vì quá trình tách electron ra xa hạt nhân cần nhận năng lượng nên năng lượng ion hoá bao giờ cũng có dấu dương (giống một phản ứng thu nhiệt).

Năng lượng ion hoá là một trong những tính chất đặc trưng nhất của nguyên tố và có thể xác định trực tiếp được. Nó quy định tính chất của liên kết hoá học và ở một múc độ nhất định, độ bền liên kết; nó quy định tính chất oxi hoá - khử của các nguyên tố...

Vì vậy, việc nghiên cứu những yếu tố ảnh hưởng đến năng lượng ion hoá là hết sức quan trọng. Cũng chính những yếu tố này sẽ giúp ta hiểu được nhiều quy luật biến đổi tính chất của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

2.1. Những yếu tố ảnh hưởng đến năng lượng ion hoá

Ta biết rằng năng lượng ion hoá (I) của một nguyên tố về trị số bằng năng lượng của electron liên kết yếu nhất với hạt nhân nguyên tử nhưng ngược dấu nhau.

$$I = -E = \frac{Z^2}{n^2} \times \frac{2\pi^2 me^4}{h^2}$$

Trong đó: Z là điện tích hạt nhân nguyên tử.

n là số lượng tử chính (số lớp của electron bị tách ra).

h là hằng số Planck.

m, e là khối lượng và điện tích của electron.

Nếu nguyên tử chỉ gồm có hạt nhân và một electron thì năng lượng ion hoá phụ thuộc vào:

– Điện tích hạt nhân nguyên tử (Z).

– Khoảng cách giữa electron và hạt nhân (n).

(1) 1eV = 1,6022 × 10^{-19}J; 1eV = 96,487 kJ/mol

Nếu nguyên tử có nhiều electron thì ngoài những yếu tố trên, năng lượng ion hoá còn phụ thuộc vào tương tác đẩy giữa các electron (hiệu ứng chắn) và vào hình dạng của obitan (hiệu ứng xâm nhập).

2.1.1. Hiệu ứng chắn

Trong nguyên tử, ngoài electron được tách ra còn có các electron khác, cho nên ngoài lực hút của hạt nhân, electron đang xét đó còn chịu lực đẩy của các electron khác còn lại. Kết quả là lực hút của hạt nhân đó bị giảm đi dường như là điện tích của hạt nhân bị giảm đi một lượng. Một cách hình ảnh, có thể cho rằng các electron còn lại tạo nên một màn chắn giữa hạt nhân và electron đang xét, làm cho chỉ một phần điện tích hạt nhân có tác dụng thực sự với electron đó.

Điện tích có tác dụng thực sự với electron gọi là *điện tích hiệu dụng* kí hiệu là Z_{hd} và $Z_{hd} = (Z - \sigma)$, trong đó σ được gọi là *hằng số chắn*, nó biểu thị một cách định lượng mức độ chắn của các electron.

Hằng số chắn σ phụ thuộc vào số electron: electron càng nhiều thì hằng số chắn càng lớn. Các electron ở các lớp, các phân lớp khác nhau có mức độ chắn khác nhau: các electron ở các lớp bên trong chắn mạnh hơn là các electron lớp ngoài ; các electron s chắn mạnh hơn electron p, electron p mạnh hơn electron d; electron d mạnh hơn electron f v.v..., ngoài ra các electron độc thân hay ghép đôi cũng có mức độ chắn khác nhau.

Như vậy, để thể hiện hiệu ứng chắn, công thức tính năng lượng ion hoá sẽ là:

$$I = \frac{(Z-\sigma)^2}{n^2}\,\frac{2\pi^2 me^4}{h^2}$$

Đối với nguyên tố hiđro: Z = 1, n = 1 (vì chỉ có một electron nên không có tương tác đẩy giữa các electron) σ = 0, do đó :

$$I_H = \frac{2\pi^2 me^4}{h^2}$$

Công thức tính năng lượng ion hoá I của các nguyên tố có thể được viết gọn là :

$$I = \frac{(Z-\sigma)^2}{n^2}\, I_H$$

2.1.2. Cách xác định hằng số chắn σ

Có nhiều cách xác định hằng số chắn σ: phương pháp thực nghiệm, quy tắc gần đúng của Slater (Slâytơ), quy tắc Clémenti-Raimondi (Clêmenti-Raimonđi) v.v... trong đó phương pháp thực nghiệm cho kết quả chính xác nhất và quy tắc Slater là đơn giản nhất, dễ áp dụng nhất.

Sau đây trình bày *cách xác định σ theo Slater.*

Các electron được chia ra làm các nhóm 1s, 2sp, 3sp, 3d, 4sp, 4d; 4f, 5sp.

Mỗi nhóm electron thêm vào σ một trị số xác định theo quy tắc sau:

– Các electron lớp bên ngoài electron bị tách ra (kể từ hạt nhân) không có ảnh hưởng gì.

– Mỗi electron trong cùng nhóm electron bị tách ra góp vào một trị số σ là 0,35 đơn vị (trừ nhóm 1s).

– Mỗi electron ở phân lớp bên trong áp sát phân lớp electron bị tách ra có σ = 0,85 đơn vị.

– Mỗi electron ở phân lớp bên trong sâu hơn phân lớp (n – 1) có σ = 1,00 đơn vị.

– Nếu electron bị tách ra nằm trên phân lớp d hay f thì phần chắn của mỗi electron ở phân lớp sâu hơn là 1,00 đơn vị.

Tổng số phần chắn của tất cả các electron (ngoài electron nghiên cứu) là hằng số chắn đối với elelctron đó.

Ví dụ 1: Hằng số chắn σ đối với một electron hoá trị (electron p^1) của nitơ là:

$_7N$:	$1s^2$	$\underbrace{2s^22p^2}$	$\underbrace{2p^1}$
	(2e ở phân lớp bên trong)	4e cùng nhóm 2sp	electron bị tách
σ =	(2 × 0,85)	+ (4 × 0,35)	= 3,10

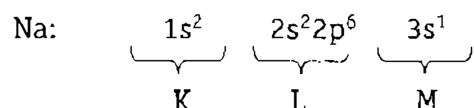
Ví dụ 2: Hằng số chắn đối với electron ngoài cùng của Gd:

$_{64}Gd$:	$\underbrace{1s^2 \ldots\ldots 4f^{14}}$	$\underbrace{5s^25p^65d^1}$	$\underbrace{6s^1}$	$\underbrace{6s^1}$
σ =	(53 × 1)	+ (9 × 0,85)	+ (1 × 0,35)	(electron bị tách)
σ =		61		

Biết σ, tính được điện tích hiệu dụng $(Z - \sigma)$.

2.1.3. Hiệu ứng xâm nhập *(ảnh hưởng của số lượng tử obitan l đến năng lượng ion hoá)*

Theo cơ học lượng tử, một electron có thể có mặt ở bất kì vị trí nào trong không gian quanh hạt nhân nguyên tử. Tất cả các electron, kể cả electron ngoài cùng, trong một khoảng thời gian nhất định cũng có thể nằm trong khu vực gần hạt nhân. Vì vậy, có thể nói rằng các electron bên ngoài xâm nhập qua các lớp electron ben trong vào gần hạt nhân. Chẳng hạn, ở nguyên tử natri:

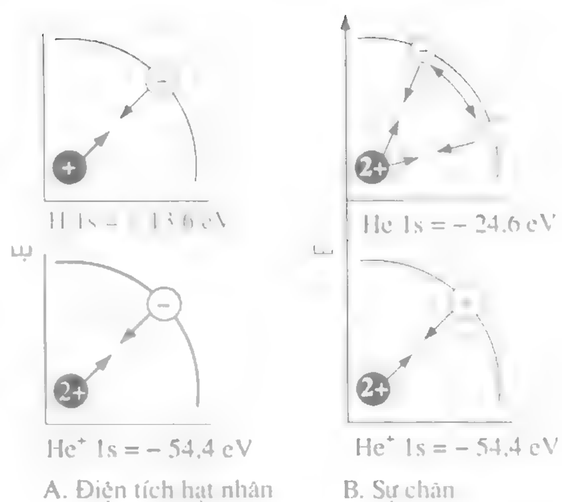


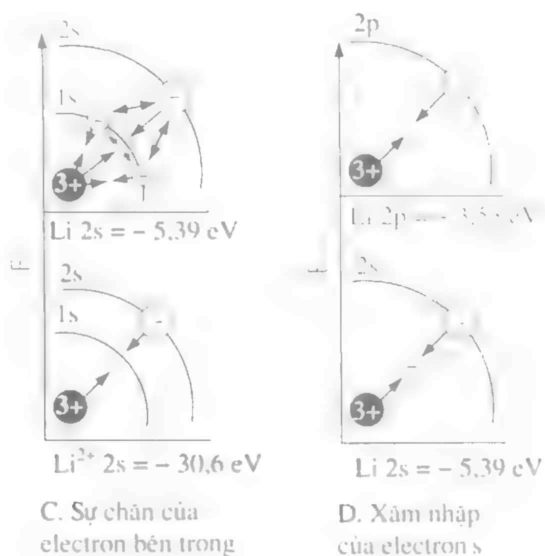
Electron 3s của lớp M có lúc nằm trong khu vực giữa lớp K và L.

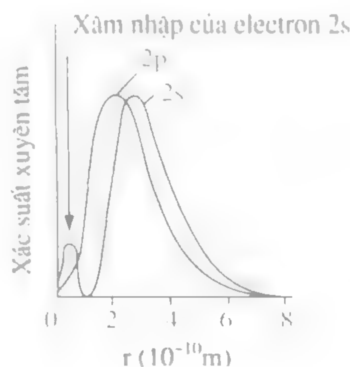
Sự xâm nhập như vậy làm tăng độ bền của liên kết giữa electron bên ngoài với hạt nhân.

Người ta nhận thấy, đối với cùng một lớp electron, mức độ xâm nhập của electron s là lớn nhất, của electron p nhỏ hơn, của electron d càng nhỏ hơn nữa. Chẳng hạn với n = 3, mức độ xâm nhập giảm dần theo thứ tự 3s > 3p > 3d... Điều này cũng phù hợp với thứ tự điền electron vào các obitan đã xét ở trên 3s, 3p, 3d...

Có thể nói, do các electron s xâm nhập sâu hơn vào các lớp bên trong nên electron s có mức độ chắn hạt nhân mạnh hơn electron p, electron p chắn mạnh hơn electron d của cùng một lớp.







Hình 3.8. Minh hoạ hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập

A. Điện tích hạt nhân càng lớn, lực hút electron càng mạnh (mũi tên đậm), làm cho electron khó bị tách ra.

B. Do đẩy nhau, các electron dường như "chắn" điện tích hạt nhân, làm cho lực hút của hạt nhân giảm đi, do đó electron dễ bị tách ra hơn.

C. Sự chắn của electron bên trong làm cho electron bên ngoài dễ bị tách ra hơn.

D. Sự phân bố xác suất xuyên tâm cho thấy: hầu hết thời gian electron 2s chuyển động hơi xa hạt nhân hơn electron 2p; nhưng trong một thời gian ngắn, nó lại xâm nhập gần hạt nhân hơn. Do vậy, electron 2s chịu tác dụng của lực hút tổng thể mạnh hơn và hơi khó tách ra hơn.

Sau đây ta vận dụng những điều vừa trình bày để xét sự biến đổi năng lượng ion hoá thứ nhất (I_1) của các nguyên tố theo các chu kì và các nhóm trong hệ thống tuần hoàn.

2.2. Sự biến đổi năng lượng ion hoá thứ nhất (I_1) của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn

2.2.1. Theo chu kì (theo hàng ngang)

a) *Chu kì 1*

– Năng lượng ion hoá của hiđro (I_H)

$$I_H = \frac{Z^2}{n^2} \times \frac{4\pi^2 me^4}{h^2}$$

Ở đây Z = 1, n = 1. Các trị số khác đều là hằng số (π = 3,1416; m = 9,1091 × 10^{-28}g; e = 4,8030 đ.v.t.đ; h = 6,6256 ec.sec).

Thay các trị số tương ứng ta sẽ được:

$$I_H = 13,6 \text{ eV}.$$

Trị số này phù hợp tốt với thực nghiệm.

– *Năng lượng ion hoá của heli (I_{He})*

$$I_{He} = \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} I_H$$

$$I_{He} = 24,6 \text{ eV}$$

Năng lượng ion hoá của heli lớn hơn năng lượng ion hoá của hiđro vì số lớp electron như nhau (n = 1) và điện tích hạt nhân tăng lên. Nếu không kể đến hiệu ưng chắn thì khi điện tích hạt nhân tăng từ 1 đến 2, thì năng lượng ion hoá phải tăng từ 13,6 eV ở hiđro đến 2^2 × 13,6 = 54,4 eV ở heli.

Nhưng vì có hiệu ứng chắn nên năng lượng ion hoá của heli xác định bằng thực nghiệm chỉ bằng 24,6 eV. Từ đó suy ra điện tích hiệu dụng (Z – σ) của heli chỉ bằng 1,345 (nghĩa là lớn hơn điện tích hạt nhân của hiđro và nhỏ hơn điện tích hạt nhân của heli).

$$Z_{hd} = (Z - \sigma) \Rightarrow \sigma = (Z - Z_{hd}) = 2 - 1,345 = 0,655.$$

Như vậy, trong nguyên tử heli, một trong hai electron 1s đã làm giảm tác dụng hút của hạt nhân đối với electron kia (electron bị tách ra) là 0,655 đơn vị.

Tóm lại, trong chu kì 1, đi từ hiđro đến heli, năng lượng ion hoá tăng từ 13,6 eV đến 24,6 eV.

b) *Chu kì 2*

Bảng dưới đây ghi năng lượng ion hoá thứ nhất (I_1) của các nguyên tố thuộc chu kì 2 và điện tích hạt nhân, điện tích hiệu dụng, hằng số chắn, độ tăng hằng số chắn của nguyên tử các nguyên tố đó. Để tiện so sánh, trong bảng còn ghi cả các trị số trên đối với các nguyên tố thuộc chu kì 1.

Bảng 3.6. Năng lượng ion hoá thứ nhất của các nguyên tố thuộc chu kì 1 và chu kì 2

Nguyên tố	Điện tích hạt nhân (Z)	Điện tích hiệu dụng (Z_{hd})	Hằng số chắn (σ)	Độ tăng hằng số chắn (Δσ)	Năng lượng ion hoá I_1 (eV)
H	1	1	0		13,6
He	2	1,345	0,655	0,655	24,6
Li	3	1,26	1,740	1,085	5,390
Be	4	1,66	2,34	0,60	9,320
B	5	1,56	3,44	1,10	8,296
C	6	1,82	4,18	0,74	11, 264
N	7	2,07	4,93	0,75	14,540
O	8	2,00	6,00	1,07	13,614
F	9	2,28	6,72	0,72	17,418
Ne	10	2,52	7,48	0,76	21,559

Dựa vào bảng trên, ta phân tích kĩ hơn sự biến đổi năng lượng ion hoá khi chuyển từ nguyên tố nọ đến nguyên tố kia.

– *Từ heli ($1s^2$) đến liti ($1s^22s^1$)*, (tức là từ cuối chu kì 1 đến đầu chu kì 2).

$$I_{He} = 24,6 \text{ eV} \Rightarrow I_{Li} = 5,39 \text{ eV}$$

Khi chuyển từ heli đến liti năng lượng ion hoá giảm đột ngột (hơn bốn lần). Sở dĩ như vậy là do hai nguyên nhân:

$$I_{Li} - \frac{(Z-\sigma)^2}{2^2} I_H$$

(1) Số lớp electron tăng lên (n = 1 ở heli tăng lên n = 2 ở liti).

(2) Từ heli đến liti, Z tăng lên một đơn vị (ΔZ = 1) nhưng hằng số chắn lại tăng lên quá một đơn vị (Δσ = 1,085), do đó khi số thứ tự của nguyên tố tăng, điện tích hiệu dụng chẳng những không tăng, lại hơi giảm đi. Đó là do ở nguyên tử liti, electron bị tách ra là electron $2s^1$ nằm xa hạt nhân hơn nhiều so với lớp electron thứ nhất 1s; mặt khác *lớp electron $1s^2$ bên trong* đã đầy đủ *gây nên hiệu ứng chắn mạnh hơn nhiều so với electron cùng lớp.*

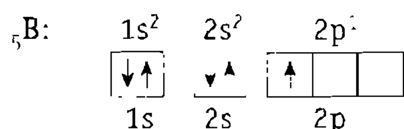
– *Từ liti ($1s^2 2s^1$) đến neon ($1s^2 2s^2 2p^6$)*

Tất cả các nguyên tố trong chu kì đều có trị số n như nhau (ở đây n = 2). Năng lượng ion hoá chỉ còn phụ thuộc vào điện tích hiệu dụng của mỗi nguyên tố. Từ nguyên tố nọ đến nguyên tố kia, điện tích hiệu dụng tăng thì năng lượng ion hoá tăng và ngược lại.

Qua bảng trên ta thấy, từ đầu đến cuối chu kì, nhìn chung năng lượng ion hoá tăng dần: 5,39 eV ở liti và 21,559 eV ở neon, nhưng sự biến đổi diễn ra không đơn điệu khi điện tích hạt nhân tăng tuần tự từ 3 đến 10.

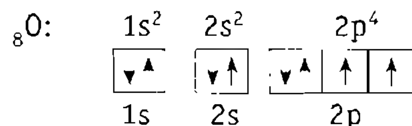
Năng lượng ion hoá của bo (Z = 5) và oxi (Z – 8) có giảm đi chút ít so với năng lượng ion hoá của nguyên tố đứng trước. Sở dĩ như vậy là vì:

+ Nguyên tố bo có cấu hình electron như sau:



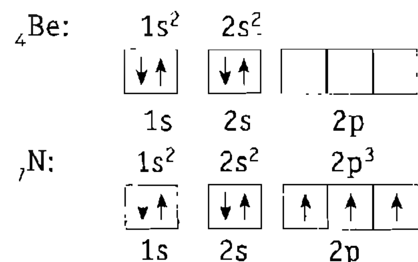
Electron $2p^1$ nằm ngoài phân lớp $2s^2$ đã đầy đủ, có mức độ chắn hạt nhân mạnh nên điện tích hạt nhân tuy có tăng lên (so với nguyên tố đứng trước là beri có Z = 4) nhưng điện tích hiệu dụng lại giảm đi chút ít, do đó năng lượng ion hoá cũng giảm đi chút ít.

+ Nguyên tố oxi có cấu hình electron như sau:



Như vậy, ở một obitan 2p có hai electron đã ghép đôi. Ở đây sẽ phát sinh tương tác đẩy của hai electron trong cùng một obitan làm cho một trong hai electron đó dễ bị tách ra. Kết quả là điện tích hiệu dụng giảm đi, do đó năng lượng ion hoá giảm đi.

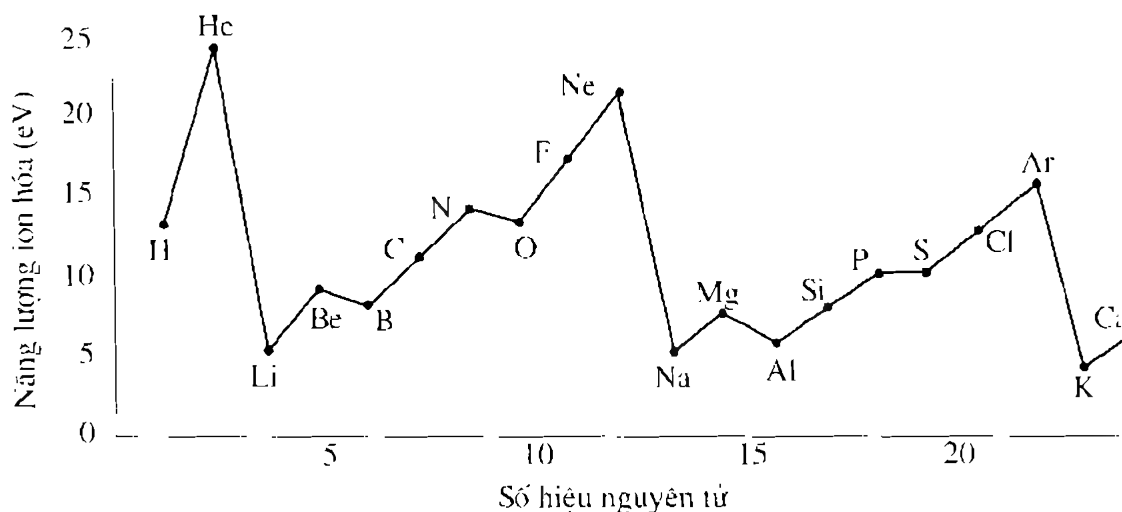
Qua hai trường hợp trên ta cũng thấy rằng: cấu hình s^2 bão hoà (ở beri) và cấu hình p^3 nửa bão hoà (ở nitơ) là những cấu hình tương đối bền, có năng lượng ion hoá khá lớn.



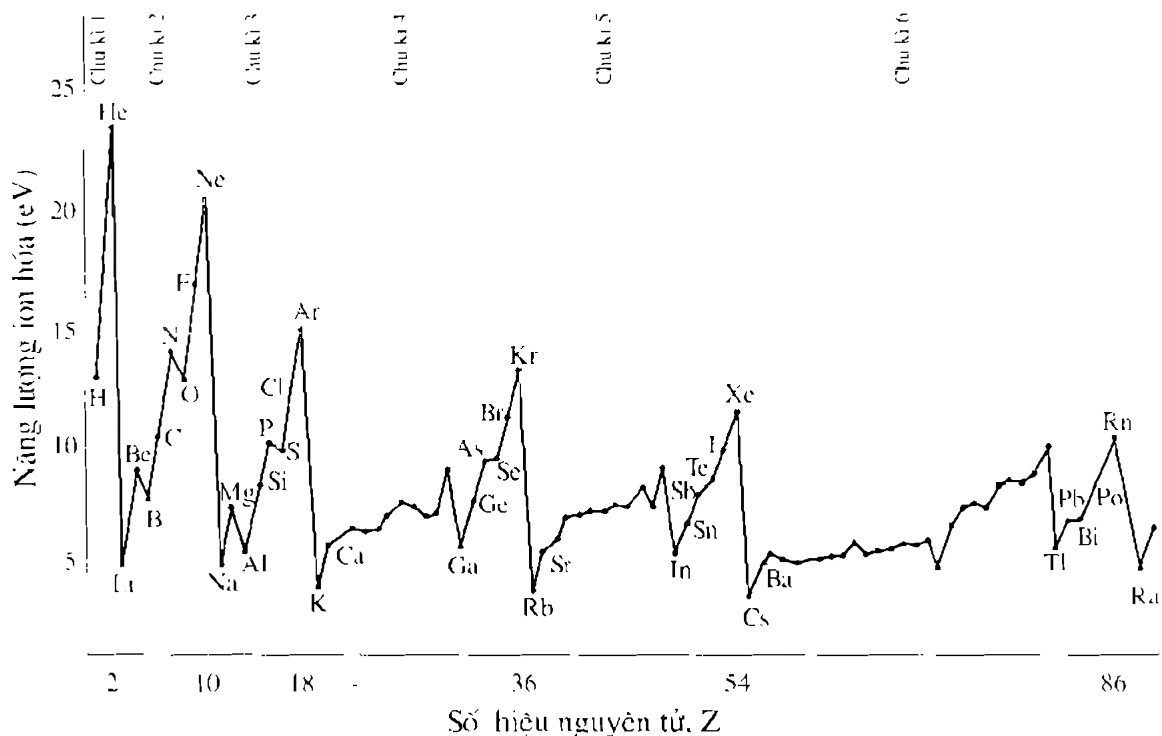
c) *Các chu kì sau*

Sự biến đổi năng lượng ion hoá của các nguyên tố thuộc các chu kì sau cũng diễn ra tương tự như trên.

Hình 3.9 thể hiện sự biến đổi năng lượng ion hoá của các nguyên tố thuộc chu kì 1, 2, 3.



Hình 3.9. Năng lượng ion hoá (eV) của các nguyên tố chu kì 1, 2, 3



Hình 3.10. Đồ thị biểu diễn sự biến đổi I_1 theo điện tích hạt nhân Z

– *Đối với các nguyên tố chuyển tiếp*, năng lượng ion hoá ít thay đổi khi đi từ nguyên tố nọ đến nguyên tố kia vì các electron thêm vào đều là những electron cùng phân lớp, lại ở sâu bên trong.

Hơn nữa, năng lượng ion hoá của chúng có trị số lớn hơn so với các nguyên tố thuộc nhóm A, vì các electron thuộc phân lớp (n – 1)d gây nên một hiệu ứng chắn không mạnh bằng các electron thuộc phân lớp s và p.

Chẳng hạn như kali và đồng cùng ở chu kì 4, lớp ngoài cùng đều có một electron (nhưng thuộc nhóm IA và IB); hoặc canxi và kẽm cũng thuộc chu kì 4, lớp ngoài cùng đều có hai electron (nhưng thuộc nhóm IIA và IIB), năng lượng ion hoá của chúng có các giá trị như sau:

Nguyên tố	K(IA)	Cu(IB)	Ca(IIA)	Zn(IIB)
I_1(eV)	4,32	7,67	6,25	9,87

(Năng lượng ion hoá của các nguyên tố chuyển tiếp sẽ được xét kĩ hơn ở phần dưới).

2.2.2. Theo nhóm (theo cột dọc)

a) *Đối với các nguyên tố nhóm A*

Trong phạm vi một nhóm, theo chiều từ trên xuống dưới, khi đi từ nguyên tố nọ đến nguyên tố kia, điện tích hạt nhân tăng nhanh nhưng hằng số chắn cũng tăng nhanh, vì các electron thuộc các lớp sâu bên trong gây nên hiệu ứng chắn mạnh; hơn nữa, theo chiều từ trên xuống dưới, trị số của n tăng, số lớp electron tăng, bán kính nguyên tử tăng, vì vậy năng lượng ion hoá giảm dần (Sự giảm năng lượng ion hoá gần song song với sự tăng bán kính nguyên tử).

Chẳng hạn, đối với nhóm IA (các kim loại kiềm)

Nguyên tố	Li	Na	K	Rb	Cs
I_1(eV)	5,39	5,14	4,34	4,18	3,89

b) *Đối với các nguyên tố nhóm B*

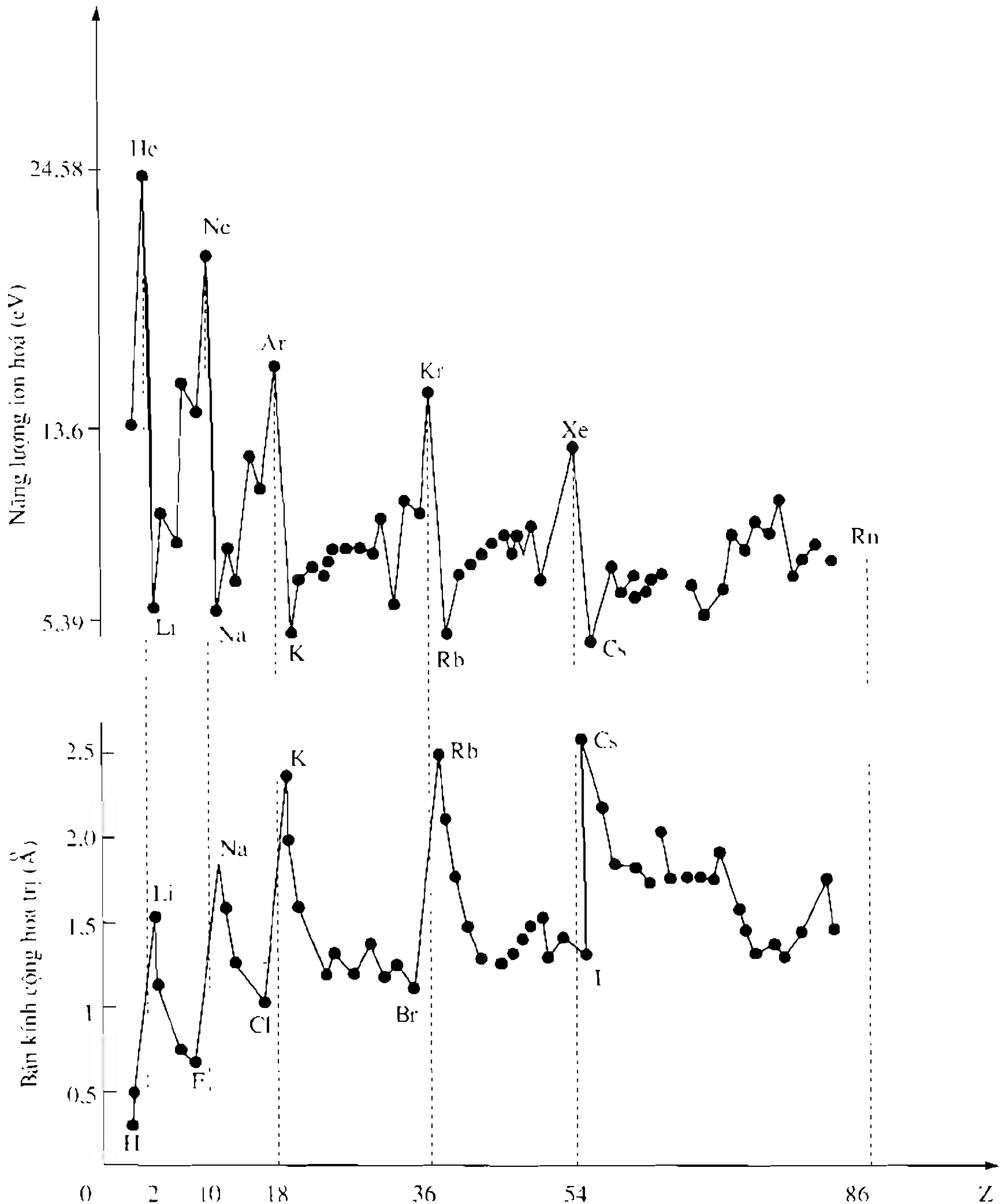
Nói chung sự biến đổi năng lượng ion hoá trong các nhóm B diễn ra không theo quy luật chặt chẽ như đối với các nguyên tố nhóm A. Chẳng hạn:

Bảng 3.7. Năng lượng ion hoá thứ nhất đối với các nguyên tố nhóm IB, IIB, IVB

IB	I_1(eV)	IIB	I_1(eV)	IVB	I_1(eV)
$_{29}Cu$	7,72	$_{30}Zn$	9,39	$_{24}Cr$	6,76
$_{47}Ag$	7,57	$_{48}Cd$	8,99	$_{42}Mo$	7,13
$_{79}Au$	9,22	$_{80}Hg$	10,43	$_{74}W$	7,97

Điều đó có liên quan đến sự biến đổi bán kính nguyên tử của các nguyên tố thuộc các nhóm B (đã xét ở phần bán kính nguyên tử).

Sau khi đã xem xét sự biến đổi năng lượng ion hoá của các nguyên tố theo các chu kì và các nhóm, bây giờ ta xét chung sự biến đổi năng lượng ion hoá của các nguyên tố theo chiều tăng của điện tích hạt nhân nguyên tử trong hệ thống tuần hoàn.



Hình 3.11. So sánh sự phụ thuộc của năng lượng ion hoá và bán kính nguyên tử theo điện tích hạt nhân. Hai đường cong đối xứng gương với nhau.

Bảng 3.8. Năng lượng ion hoá thứ nhất của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn (eV)

(H)																H 13,595	He 24,58
Li 5,390	Be 9,320											B 8,926	C 11,264	N 14,54	O 13,641	F 17,418	Ne 21,559
Na 5,138	Mg 7,644											Al 5,984	Si 8,149	P 10,55	S 10,397	Cl 13,01	Ar 15,755
K 4,339	Ca 6,111	Sc 6,56	Ti 6,83	V 6,74	Cr 6,764	Mn 6,432	Fe 7,90	Co 7,86	Ni 7,633	Cu 7,724	Zn 9,391	Ga 6,00	Ge 7,88	As 9,81	Se 9,75	Br 11,84	Kr 13,996
Rb 4,176	Sr 5,692	Y 6,377	Zr 6,835	Nb 6,881	Mo 7,131	Tc 7,23	Ru 7,461	Rh 7,461	Pd 8,33	Ag 7,574	Cd 8,991	In 5,785	Sn 7,332	Sb 8,639	Te 9,01	I 10,44	Xe 12,127
Cs 3,893	Ba 5,210	La 5,61	Hf 5,5	Ta 7,7	W 7,98	Re 7,87	Os 8,7	Ir 9,2	Pt 9	Au 9,22	Hg 10,434	Tl 6,106	Pb 7,415	Bi 7,487	Po 8,43	At	Rn 10,745
Fr	Ra 5,277	Ac															

Đồ thị này cho ta một hình ảnh rõ ràng về sự biến đổi tuần hoàn các cực đại và cực tiểu.

Các cực đại chính: ứng với cấu hình electron $1s^2$; ns^2np^6 (các khí hiếm).

– *Các cực tiểu chính:* ứng với cấu hình electron $(n-1)s^2$ $(n-1)p^6$ ns^1 (các kim loại kiềm).

Do tác dụng chắn khác nhau của các cấu hình electron khác nhau nên sự biến thiên năng lượng ion hoá theo điện tích hạt nhân nói chung là tuần hoàn, nhưng không diễn ra đơn điệu theo các chu kì: ở mỗi chu kì lại xuất hiện các cực đại và cực tiểu phụ.

– *Các cực đại phụ* ứng với cấu hình electron của các phân lớp bão hoà hoặc nửa bão hoà :

ns^2, $(n-1)d^{10}ns^2$ (các nguyên tố nhóm II)

np^3 (các nguyên tố nhóm IIIA)

$(n-1)d^5$; $(n-2)f^7$.

– *Các cực tiểu phụ*: ứng với cấu hình electron:

ns^2 np^1; $(n-1)d^{10}$ ns^1; np^4,...

Trong mọi trường hợp, mỗi khi chuyển từ nguyên tố nọ đến nguyên tố kia, điện tích hạt nhân tăng lên một đơn vị mà hằng số chắn tăng quá một đơn vị thì năng lượng ion hoá giảm.

Điều đó thể hiện rõ nhất khi chuyển từ chu kì nọ qua chu kì kia.

Ở ranh giới chuyển tiếp từ electron s đến electron p cũng như từ các electron p không ghép đôi đến các electron p ghép đôi cũng có sự giảm năng lượng ion hoá.

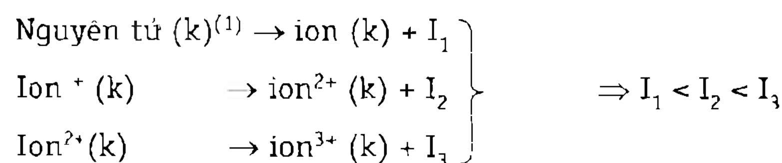
Đối với các electron d và f, những điều kể trên không thể hiện rõ lắm.

Ngược lại, khi điện tích hạt nhân tăng một đơn vị mà hằng số chắn tăng dưới một đơn vị thì năng lượng ion hoá tăng.

2.3. Năng lượng ion hoá thứ hai, thứ ba...

Năng lượng ion hoá thứ hai (I_2), thứ ba (I_3)... là năng lượng cần thiết để tách electron ra khỏi các ion dương.

Năng lượng ion hoá I_2, I_3... của một nguyên tố có trị số ngày càng lớn vì ở đây không phải tách electron ra khỏi nguyên tử trung hoà mà là tách ra khỏi ion dương có điện tích ngày càng lớn.



Nguyên tử (k)[1] → ion (k) + I_1

Ion $^+$ (k) → ion^{2+} (k) + I_2

Ion^{2+}(k) → ion^{3+} (k) + I_3

$\Rightarrow I_1 < I_2 < I_3$

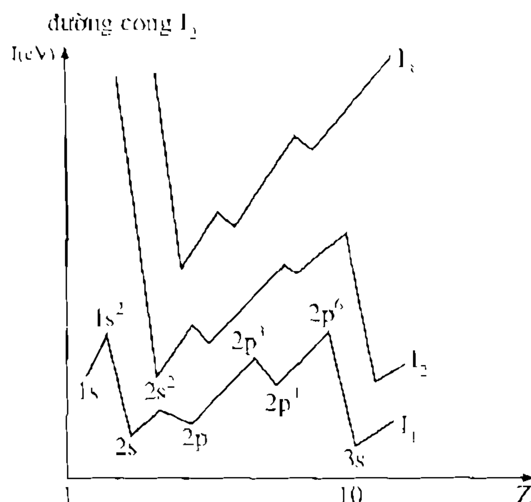
(1) Kí hiệu (k) ở đây dùng để chỉ nguyên tử hay ion ở trạng thái khí.

Cần lưu ý rằng sự tăng năng lượng ion hoá đối với các nấc kế tiếp diễn ra không đều đặn mà có bước nhảy vọt. Bước nhảy xuất hiện sau khi các electron lớp ngoài (electron hoá trị) đã bị tách ra. Do đó cần một năng lượng rất lớn để tách electron lớp bên trong.

Chẳng hạn, đối với bo (B)

I_1(eV)	<	I_2	<	I_3	<<	I_4	<	I_5
8,296		25,149		37,920		259,298		340,127

Như vậy, bo có ba electron ở mức năng lượng cao nhất ($1s^2 2s^2 2p^1$). Vì cần năng lượng rất lớn để tách các electron ở lớp vỏ bên trong nên những electron này *không* tham gia vào các phản ứng hoá học; do đó mà B chỉ có hoá trị cao nhất là 3+.



Hình 3.12. Sự phụ thuộc năng lượng ion hoá thứ nhất (I_1), thứ hai (I_2), thứ ba (I_3) theo điện tích hạt nhân nguyên tử.

Xét đường cong phụ thuộc của năng lượng ion hoá thứ hai, thứ ba theo điện tích hạt nhân (hình 3.12), ta thấy có sự tương tự nhau giữa các đường cong I_1, I_2, I_3; đường cong I_2 phân bố cao hơn đường cong I_1; đường cong I_3 cao hơn đường cong I_2.

Bảng sau đây ghi năng lượng ion hoá đối với các nấc kế tiếp nhau của các nguyên tố thuộc chu kì 1 và chu kì 2. ($I_1 \rightarrow I_8$) và năng lượng ion hoá I_1, I_2 của các nguyên tố còn lại trong hệ thống tuần hoàn.

Bảng 3.9. Năng lượng ion hoá thứ nhất (I_1) cho đến thứ tám (I_8) của các nguyên tố chu kì 1, chu kì 2

Z	Nguyên tố	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	I_8
1	H	13,595							
2	He	24,580	54,403						
3	Li	5,390	75,619	112,420					
4	Be	9,320	18,206	153,850	217,657				

Z	Nguyên tố	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	I_8
5	B	8,926	25,149	37,920	259,298	340,127			
6	C	11,264	24,376	47,864	64,476	391,986	489,84		
7	N	14,54	29,605	47,426	77,450	97,863	551,925	666,83	
8	O	13,614	35,146	54,934	77,394	113,873	138,080	739,114	871,12
9	F	17,418	34,98	62,646	87,23	114,214	157,117	185,139	953,60
10	Ne	21,559	41,07	63,5	97,16	126,4	157,91		

Năng lượng ion hoá thứ nhất (I_1) và thứ hai (I_2) của các nguyên tố còn lại trong hệ thống tuần hoàn

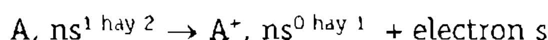
Z	Nguyên tố	I_1	I_2	Z	Nguyên tố	I_1	I_2
11	Na	5,138	47,29	28	Ni	7,633	18,15
12	Mg	7,644	15,03	29	Cu	7,724	20,29
13	Al	5,984	18,823	30	Zn	9,391	17,96
14	Si	8,149	16,34	31	Ga	6,00	20,51
15	P	10,55	19,65	32	Ge	7,88	15,93
16	S	10,375	23,4	33	As	9,81	20,2
17	Cl	13,01	23,80	34	Se	9,75	21,5
18	Ar	15,755	27,62	35	Br	11,84	21,6
19	K	4,399	31,81	36	Kr	13,996	24,56
20	Ca	6,111	11,87	37	Rb	4,176	27,5
21	Sc	6,54	12,80	38	Sr	5,692	11,027
22	Ti	6,82	13,57	39	Y	6,377	12,233
23	V	6,74	14,65	40	Zr	6,84	13,13
24	Cr	6,764	16,49	41	Nb	6,88	14,32
25	Mn	7,432	15,64	42	Mo	7,10	16,15
26	Fe	7,90	16,18	43	Tc	7,28	15,26
27	Co	7,86	17,05	44	Ru	7,36	16,76

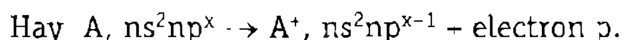
Z	Nguyên tố	I_1	I_2	Z	Nguyên tố	I_1	I_2
45	Rh	7,46	18,07	71	Lu	6,15	14,7
46	Pd	8,33	19,42	72	Hf	5,5	14,9
47	Ag	7,574	21,48	73	Ta	7,88	16,2
48	Cd	8,991	16,904	74	W	7,98	17,7
49	In	5,785	18,86	75	Re	7,87	16,6
50	Sn	7,34	14,63	76	Os	8,7	17
51	Sb	8,639	16,5	77	Ir	9	17
52	Te	9,01	18,6	78	Pt	9,0	18,56
53	I	10,454	19,09	79	Au	9,22	20,5
54	Xe	12,127	21,2	80	Hg	10,434	18,751
55	Cs	3,893	25,1	81	Tl	6,106	20,42
56	Ba	5,210	10,001	82	Pb	7,415	15,028
57	La	5,61	11,43	83	Bi	7,287	16,68
58	Ce	6,5	12,3	84	Po	8,43	19,4
59	Pr	5,7	–	85	At	9,5	20,1
60	Nd	5,7	–	86	Rn	10,745	21,4
61	Pm	–	–	87	Fr	3,83	22,5
62	Sm	5,64	11,2	88	Ra	5,277	10,144
63	Eu	5,67	11,24	89	Ac	6,9	12,1
64	Gd	6,16	12,0	90	Th	6,95	11,5
65	Tb	6,7	–	91	Pa	–	–
66	Dy	6,8	–	92	U	6,08	–
67	Ho	–	–	93	Np	–	–
68	Er	6,08	–	94	Pu	5,8	–
69	Tm	5,81	–	95	Am	6,0	–
70	Yb	6,22	12,10				

2.4. Quá trình ion hoá của các nguyên tố chuyển tiếp

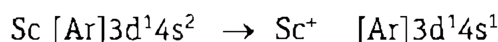
2.4.1. Sự khác nhau giữa quá trình ion hoá của các nguyên tố chuyển tiếp và nguyên tố không chuyển tiếp

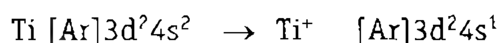
– Khi một nguyên tố không chuyển tiếp mất đi một electron thì trạng thái cơ bản của ion dương được tạo thành bao giờ cũng có cấu hình electron ở trạng thái cơ bản trước nó.

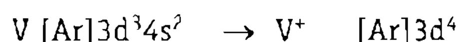

$A, ns^{1\text{ hay }2} \rightarrow A^+, ns^{0\text{ hay }1}$ + electron s

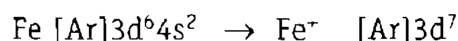

Hay $A, ns^2np^x \rightarrow A^+, ns^2np^{x-1}$ + electron p.

– Ở các nguyên tố chuyển tiếp, khi mất electron, cấu hình ion dương được tạo thành khác với cấu hình của bất kì nguyên tử trung hoà nào.

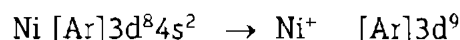

Sc $[Ar]3d^14s^2 \rightarrow Sc^+$ $[Ar]3d^14s^1$

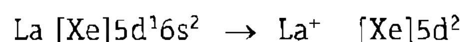

Ti $[Ar]3d^24s^2 \rightarrow Ti^+$ $[Ar]3d^24s^1$


V $[Ar]3d^34s^2 \rightarrow V^+$ $[Ar]3d^4$


Fe $[Ar]3d^64s^2 \rightarrow Fe^+$ $[Ar]3d^7$


Co $[Ar]3d^74s^2 \rightarrow Co^+$ $[Ar]3d^8$


Ni $[Ar]3d^84s^2 \rightarrow Ni^+$ $[Ar]3d^9$


La $[Xe]5d^16s^2 \rightarrow La^+$ $[Xe]5d^2$

2.4.2. Đối với các nguyên tố chuyển tiếp, khi ion hoá, bao giờ electron s cũng bị tách ra trước (chứ không phải electron d) và cấu hình của ion sẽ là $(n - 1)d^x$.

Ta có thể thấy rõ điều đó qua việc tính năng lượng ion hoá nếu tách electron s (gọi là I_s) hoặc tách electron d (gọi là I_d).

Ta lấy crom làm ví dụ:

$$_{24}Cr: \quad \underbrace{1s^22s^22p^6} \qquad \underbrace{3s^23p^63d^5} \qquad \underbrace{4s^1}$$

$$\sigma_s = (10 \times 1) + (13 \times 0{,}85) \text{ (electron bị tách ra)} = 21{,}05.$$

$$I_s = \frac{Z - 21{,}05}{4^2} I_H \qquad (1)$$

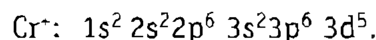
$$_{24}Cr: \quad \underbrace{1s^22s^22p^6} \quad \underbrace{3s^23p^6} \quad \underbrace{3d^4}_{\text{(e cùng nhóm)}} \quad \underbrace{3d^1}_{\text{(e bị tách)}} \quad \underbrace{4s^1}_{\text{(electron ở lớp ngoài cùng)}}$$

$$\sigma_d = (10 \times 1) + (8 \times 1) + (4 \times 0{,}35) = 19{,}40$$

$$I_d = \frac{Z - 19{,}40}{3^2} I_H \qquad (2)$$

So sánh (1) và (2) thì thấy $I_s < I_d$ (do tử số nhỏ hơn, mẫu lớn hơn).

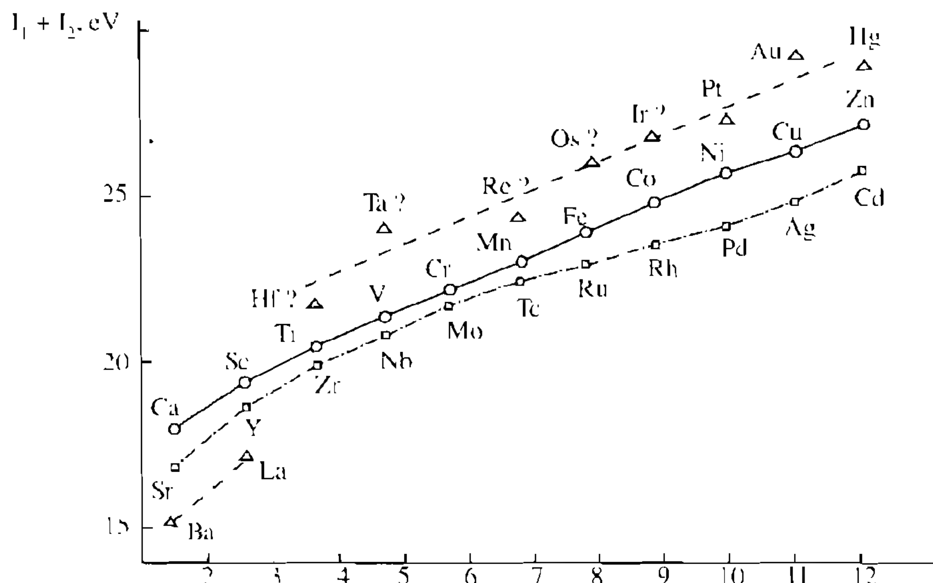
Cấu hình electron của ion Cr^+ là :



Cr^+: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$.

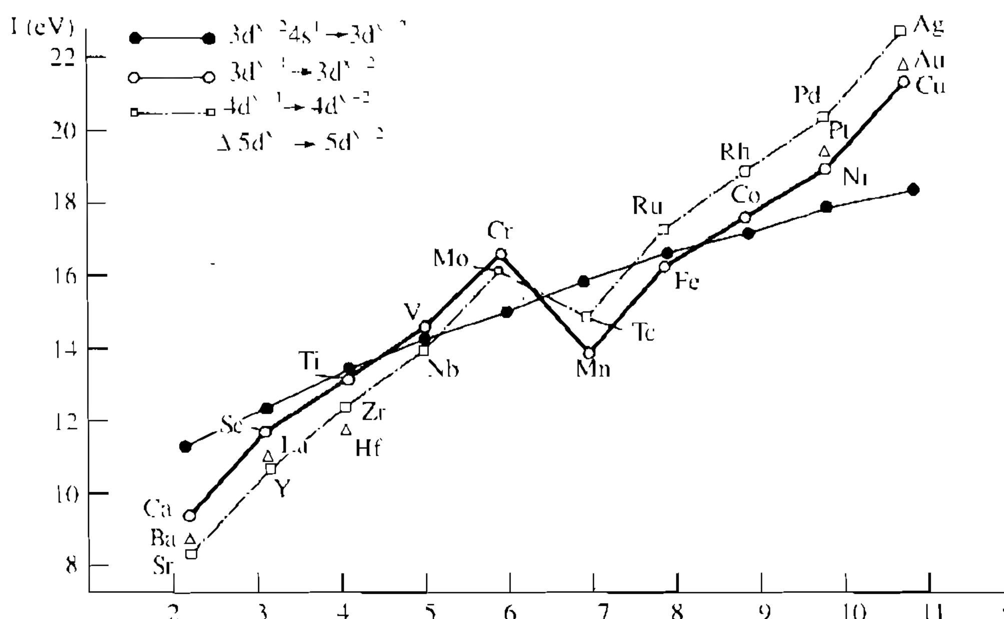
2.4.3. Đối với các nguyên tố chuyển tiếp, về mặt hoá học mà xét, tổng năng lượng ($I_1 + I_2$) nghĩa là năng lượng cần thiết để tách tất cả các electron ns có ý nghĩa quan trọng hơn I_1.

Đường cong phụ thuộc của ($I_1 + I_2$) theo Z được trình bày trên hình 3.13.



Hình 3.13. Năng lượng cần thiết để tách hai electron (I_1+I_2) ra khỏi cấu hình $d^{x-2}s^2$ đối với ba dãy nguyên tố chuyển tiếp (x thay đổi từ 2 đến 12)

24.4. Đối với cả ba dãy nguyên tố chuyển tiếp, cần lưu ý khi xét năng lượng của quá trình tách electron d ra khỏi ion (1+): $(n-1)d^{x-1} \rightarrow (n-1)d^{x-2} + I_2$



Hình 3.14. Sự phụ thuộc của năng lượng ion hoá theo cấu hình electron

Từ hình vẽ trên ta thấy:

– *Năng lượng liên kết của các electron d không ngừng tăng lên trong mỗi dãy* và có điểm *gãy khúc đột ngột* đối với các ion có cấu hình nửa bão hoà phân lớp d.



Ở Cr^{+} $[Ar]3d^5$ và $Mn^{+}$$[Ar]\ 3d^6$; Ở Mo^{+} $[Kr]4d^5$ và $Tc^{+}$$[Kr]\ 4d^6$

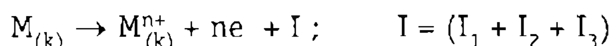
Từ Cr^+ có cấu hình d^5 nửa bão hoà đến Mn^+ với cấu hình d^6 (có sự đẩy nhau của cặp electron đã ghép đôi trong một obitan)

Từ Mo^+ có cấu hình d^5 đến Te^+ có cấu hình d^6, tương tự như trên. Tuy nhiên, sự gãy khúc ở đây không thể hiện đột ngột bằng sự gãy khúc ở Cr^+ – Mn^+ vì các obitan 4d > 3d, electron ghép đôi ở 4d đẩy nhau yếu hơn ở 3d.

– Đối với họ 5d, cũng có sự giảm năng lượng liên kết của electron so với năng lượng liên kết của họ 4d của yttri (do đó năng lượng ion hoá giảm).

2.5. Năng lượng ion hoá và sự tạo thành cation

Người ta đã biết rằng tính chất hoá học căn bản của kim loại là nguyên tử dễ mất electron hoá trị để biến thành *ion dương tự do*[1].



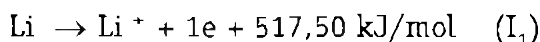
$$M_{(k)} \rightarrow M^{n+}_{(k)} + ne + I\ ; \qquad I = (I_1 + I_2 + I_3)$$

Nguyên tử kim loại nào có năng lượng ion hoá càng nhỏ càng dễ tạo thành cation, tính kim loại của nó càng mạnh. Năng lượng ion hoá đặc trưng cho khả năng tạo thành cation của các nguyên tố hoá học.

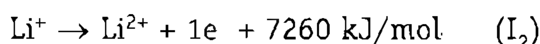
Từ tất cả những điều trình bày trên, ta thấy rõ ràng là khả năng tạo thành cation của các nguyên tố hoá học trong hệ thống tuần hoàn giảm khi đi từ đầu đến cuối chu kì và tăng khi đi từ trên xuống dưới trong phạm vi một nhóm A.

Về nguyên tắc, nguyên tử có bao nhiêu electron thì có thể tách ra ngần ấy electron. Tuy nhiên, ta cũng thấy hiển nhiên là có *giới hạn trên* đối với điện tích của cation trong các phản ứng hoá học.

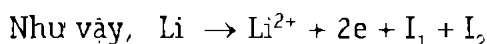
Chẳng hạn, đối với liti: $1s^2 2s^1$



$$Li \rightarrow Li^{+} + 1e + 517{,}50\ kJ/mol \qquad (I_1)$$



$$Li^{+} \rightarrow Li^{2+} + 1e + 7260\ kJ/mol \qquad (I_2)$$



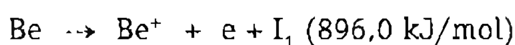
Như vậy, $Li \rightarrow Li^{2+} + 2e + I_1 + I_2$

$$I_{Li} = I_1 + I_2 = (517{,}50 + 7260) = 7777{,}50\ (kJ/mol).$$

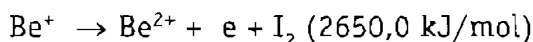
Đó là một lượng năng lượng quá lớn đối với một phản ứng hoá học. Do đó liti cũng như các nguyên tố khác của nhóm IA chỉ có thể tạo ra cation hoá trị 1+ bằng cách tách ra một electron duy nhất ở phân lớp ns của chúng.

(1) Hơn nữa, tất cả các tính chất đặc trưng cho kim loại đều do nguyên tử của chúng có những electron liên kết yếu.

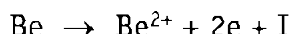
Đối với beri: $1s^2 2s^2$



$$Be \rightarrow Be^{+} + e + I_1 \ (896,0 \ kJ/mol)$$



$$Be^{+} \rightarrow Be^{2+} + e + I_2 \ (2650,0 \ kJ/mol)$$



$$Be \rightarrow Be^{2+} + 2e + I$$

$$I_{Be} = I_1 + I_2 = (896,0 + 2650,0) \ kJ/mol = 3546 \ kJ/mol.$$

Qua đó ta thấy việc tạo thành Be^{2+} đã là khó khăn, vì vậy đối với beri, việc tạo thành các hợp chất ion Be^{2+} nói chung là ít đặc trưng. Còn muốn tạo thành ion Be^{3-} thì cần tiêu tốn một năng lượng là $(I_1 + I_2 + I_3) = 17437$ kJ/mol. Rõ ràng là sự tạo thành ion Be^{3+} trong các phản ứng hoá học không thể thực hiện được.

Như vậy, đối với các nguyên tố nhóm IIA, không thể tạo ra được các cation có điện tích lớn hơn 2+ bằng con đường hoá học.

Trong chu kì 2, bắt đầu từ beri, các nguyên tố đã ít có khả năng hay không có khả năng tạo thành cation trong các phản ứng hoá học.

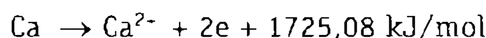
Sự tạo thành các cation có điện tích lớn về nguyên tắc có thể xảy ra nhưng phải là những quá trình có nhiệt độ rất cao, năng lượng rất lớn.

Như trên đã thấy, đối với một nguyên tố, việc tạo thành các cation có điện tích thấp dễ hơn việc tạo thành các cation có điện tích cao.

Chẳng hạn, muốn tạo thành một mol ion Ca^{+} (từ nguyên tử tự do) cần cung cấp 586,45 kJ/mol. Để tạo thành một mol ion Ca^{2+} cần cung cấp 1725,08 kJ/mol.

Nhưng đồng thời, ta cũng thấy, trong điều kiện thường, các hợp chất của canxi hoá trị hai lại bền, trong khi đó các hợp chất ứng với canxi hoá trị một không tồn tại. Ta thường gặp CaF_2 chứ không gặp CaF, v.v...

Sở dĩ như vậy là vì trong các phản ứng hoá học, khi tạo thành một hợp chất ion như trường hợp CaF_2, xảy ra các quá trình sau:



$$Ca \rightarrow Ca^{2-} + 2e + 1725,08 \ kJ/mol$$



$$2F + 2e \rightarrow 2F^{-} \qquad - 796,71 \ kJ/mol$$



$$Ca^{2+} + 2F^{-} \rightarrow CaF_2 \qquad - 2574,88 \ kJ/mol$$

Như vậy là ngoài năng lượng ion hoá I cần thiết để tạo ra Ca^{2+} còn có năng lượng E toả ra khi các nguyên tử F thu electron để tạo thành ion florua F^{-} (E là ái lực với electron). Thêm vào đó lại còn năng lượng U toả ra khi các ion Ca^{2-} kết hợp với các ion F^{-} để tạo thành mạng lưới tinh thể CaF_2 (U là năng lượng mạng lưới).

Năng lượng mạng lưới của CaF_2 là 2574,88 kJ/mol khi tạo thành một mol phân tử hay $2574,88/_2$ khi tạo thành một mol đương lượng từ các ion ngược dấu nhau.

Ở đây, năng lượng toả ra là (E + U) = (796,71 + 2574,88) = 3371,59 kJ.

Năng lượng này vượt quá năng lượng cần cung cấp để ion hoa canxi là (3371,59 – 1725,8) = 1645,8 kJ khi tạo thành một mol phân tử CaF_2 hay $\frac{1645,8}{2}$ = 823 kJ khi tạo thành một mol đương lượng CaF_2.

Ta đã biết rằng năng lượng mạng lưới của các hợp chất ion tỉ lệ thuận với điện tích của các ion và tỉ lệ nghịch với khoảng cách giữa các ion (cation và anion). Trong trường hợp của CaF, vì điện tích của Ca^+ nhỏ hơn của ion Ca^{2+}; bán kính của ion Ca^+ lại lớn hơn bán kính của ion Ca^{2+}, vì vậy năng lượng mạng lưới tinh thể CaF nhỏ hơn năng lượng mạng lưới tinh thể CaF_2 và chỉ bằng 764,94 kJ khi hình thành một mol phân tử CaF (cũng là một mol đương lượng).

Các quá trình xảy ra như sau:



$$Ca \rightarrow Ca^+ + e + I \quad (586,45 \text{ kJ/mol})$$



$$F + 1e \rightarrow F^- - E \quad (398,35 \text{ kJ.mol})$$



$$Ca^+ + F^- \rightarrow CaF - U \quad (764,94 \text{ kJ/mol})$$

Ở đây năng lượng toả ra (ái lực với electron và năng lượng mạng lưới) vượt quá năng lượng phải cung cấp (năng lượng ion hoá) là

$$[(-398,35) + (-764,94)] - (-586,45) = -576,79 \text{ kJ/mol}$$

Như vậy khi tạo thành một mol đương lượng CaF_2 (từ các nguyên tử tự do) nhiệt toả ra la 823,25 kJ/mol, trong khi đó để tạo thành một mol đương lượng CaF, nhiệt toả ra chỉ bằng 576,79 kJ/mol. Vì vậy, trong điều kiện thường, CaF không bền bằng CaF_2, nó sẽ tự phản ứng để biến thành Ca và CaF_2.

Từ đó rút ra kết luận sau:

• Đối với khả năng tạo thành hợp chất ion, yếu tố quyết định không phải chỉ là năng lượng ion hoá của một nguyên tố mà là tương quan giữa năng lượng ion hoá và năng lượng toả ra khi tạo thành tinh thể (hay phân tử) từ các ion ngược dấu nhau (E và U).

• Đó là nguyên nhân cho ta biết vì sao *trong các hợp chất ion, các nguyên tố thuộc các nhóm IA, IIA, IIIA bao giờ cũng thể hiện hoá trị tương ứng với số nhóm trong hệ thống tuần hoàn.*

Qua những điều trình bày trên ta thấy: năng lượng ion hoá đặc trưng cho khả năng mất electron của một nguyên tố để trở thành ion dương. Kim loại là những nguyên tố dễ mất electron vì có năng lượng ion hoá nhỏ.

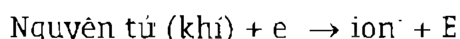
Tuy nhiên, cần chú ý rằng khi nói đến năng lượng ion hoá của một nguyên tố là nói đến năng lượng cần thiết để tách electron ra khỏi *nguyên tử tự do* (ở trạng thái khí); còn nói đến hoạt động hoá học của một kim loại (cũng như của các chất nói chung) là nói đến khả năng tham gia phản ứng (chẳng hạn phản ứng oxi hoá – khử) của *đơn chất* kim loại đó.

Ngoài năng lượng ion hoá, còn có nhiều yếu tố khác ảnh hưởng đến hoạt động hoá học của kim loại, ta sẽ đề cập trong mục "Sự biến đổi tuần hoàn thế điện cực" ở phần dưới.

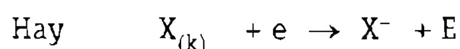
3. ÁI LỰC VỚI ELECTRON (CÒN GỌI LÀ NĂNG LƯỢNG ÁI LỰC VỚI ELECTRON)

Nhiều nguyên tố có khả năng nhận một, hai hay ba electron để tạo thành ion âm. Điều đó xảy ra khi lực đẩy của tất cả các electron kể cả electron thêm vào nhỏ hơn lực hút của hạt nhân.

Ái lực với electron (E) của một nguyên tố là năng lượng toả ra (hay thu vào) khi nguyên tử ở trạng thái tự do nhận electron để tạo thành ion âm.



Nguyên tử (khí) + e → ion⁻ + E



Hay $X_{(k)} + e \rightarrow X^- + E$

Ái lực với electron được đo bằng eV hoặc kcal/mol hoặc kJ/mol.

– Khi tạo nên một anion bền, quá trình giải phóng năng lượng E < 0. Ví dụ:



$$F_{(k)} + e \rightarrow F_{(k)} \qquad E = -3{,}45 \text{ eV}$$

Theo quy ước nhiệt động học, dấu âm chỉ quá trình phát nhiệt, dấu dương chỉ quá trình thu nhiệt.

Khi tạo nên một anion không bền, quá trình cần cung cấp năng lượng. Ví dụ:



$$Be_{(k)} + e \rightarrow Be^-_{(k)} \qquad E = +0{,}19 \text{ eV}$$

Nói chung, giá trị của *E càng âm, khuynh hướng nhận electron càng mạnh* và ngược lại, ái lực với electron có giá trị *càng dương càng ít khuynh hướng tạo thành ion âm.*

Cần phân biệt ái lực với electron thứ nhất (E_1), thứ hai (E_2), thứ ba (E_3) ... E_1 thường có giá trị âm, còn E_2, E_3... bao giờ cũng có giá trị dương vì cần cung cấp năng lượng để thắng lực đẩy của ion âm.

Ví dụ:



$$O_{(k)} + e \rightarrow O^-_{(k)} \qquad E_1 = -1{,}47 \text{ eV}$$



$$O^-_{(k)} + e \rightarrow O^{2-}_{(k)} \qquad E_2 = +7{,}3 \text{ eV}$$

Việc xác định trực tiếp ái lực với electron bằng thực nghiệm khó hơn nhiều so với việc xác định năng lượng ion hoá. Người ta mới xác định được ái lực với electron của một số ít nguyên tố phi kim mạnh.

Ái lực với electron thường được xác định gián tiếp theo chu trình Born – Haber (Booc – Habơ) và về sau dựa vào những tính toán cơ lượng tử.

Bảng dưới đây ghi trị số ái lực với electron của một số nguyên tố.

Bảng 3.10. Ái lực với electron của một số nguyên tố (eV)

H -0,75	Li -0,58	Be +0,19	B -0,33	C -1,12	N +0,27	O **-1,47**	F **-3,45**			
	Na -0,78	Mg +0,32	Al -0,52	Si -1,39	P -0,78	S **-2,07** (+3,4)	Cl **-3,61**			
	Cu **1,5**	Ag **-2,0**	Au **-2,8**			Se (+4,2)**	Br **-3,36**	I **-3,06**		
K -0,92 -0,50	Ca +1,6	Sc +0,14 +0,4	Ti -0,40 -0,15	V -0,94 -0,65	Cr -0,98 -0,85	Mn +1,07 +1,2	Fe -0,58 -0,1	Co -0,94 +0,7	Ni -1,28 -1,1	Cu -1,80*** -0,9****
Rb -0,6	Sr +0,5	Y -0,3	Zr -1,0	Nb -1,3	Mo -1,3	Tc -1,0	Ru -1,45	Rh 1,35	Pd 1,4	Ag 0,9****

** Các chữ số in đậm là giá trị ái lực với electron được xác định bằng thực nghiệm (như đối với F, Cl, Br, I, O, S...). Các số còn lại được tính theo các phương pháp khác.

*** Các số ghi trên dòng này được Clémenti tính theo phương pháp Hartri – Fok.

**** Các số ghi trên dòng này được Trerkina và Diatkina tính theo phương pháp bán kính nghiệm của Glokler.

Nhận xét:

(1) Qua bảng trên ta thấy sự biến đổi ái lực với electron của các nguyên tố theo hàng ngang và cột dọc trong hệ thống tuần hoàn diễn ra không đều đặn như đối với bán kính nguyên tử và năng lượng ion hoá.

Trong *một chu kì*, khi đi từ trái qua phải nói chung ái lực với electron của các nguyên tố ngày càng tăng, E có giá trị ngày càng âm. Ta cũng thấy các phi kim có ái lực với electron âm hơn các kim loại.

Trong *một nhóm*, khi n tăng, nói chung ái lực với electron của các nguyên tố giảm dần, E có giá trị kém âm hơn.

(2) *Ái lực với electron của các nguyên tố thuộc chu kì 2 bao giờ cũng thấp hơn ái lực với electron của các nguyên tố tương ứng thuộc chu kì 3* (ngược với điều ta dự đoán vì các nguyên tố đầu nhóm là những nguyên tố có tính phi kim mạnh nhất nhóm).

Ví dụ: Chu kì 2 $E_F = -3,45$ eV $E_O = -1,47$ eV

Chu kì 3 $E_{Cl} = -3,61$ eV $E_S = -2,07$ eV

Sở dĩ như vậy trước hết là do các nguyên tố chu kì 2 có bán kính nguyên tử nhỏ, do đó mà mật độ electron của các ion tương ứng rất cao. Vì dụ, nếu ta coi mật độ điện tích của ion là $\rho = \frac{e}{\frac{4}{3}\pi r^3}$ thì tỉ lệ mật độ điện tích giữa F và Cl là 2,35 trong khi đó thì tỉ lệ mật độ điện tích giữa Cl^- và Br^- là 1,25 và giữa Br^- và I^- là 1,36.

Mật độ electron cao làm tăng tương tác đẩy giữa các electron, làm nguyên tử khó kết hợp với electron hơn là nguyên tử cùng nhóm thuộc chu kì sau.

(3) *Ái lực với electron của các nguyên tố nhóm IIA có giá trị dương* (thu nhiệt).

Ví dụ: $E_{Be} = +0,19$ eV $\qquad$ $E_{Mg} = +0,32$ eV

Be: $1s^2 2s^2$ $\qquad$ Mg: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

Sở dĩ như vậy là do: tác dụng chắn hạt nhân của electron s rất lớn, hơn nữa phân lớp ns đã đầy đủ, electron thêm vào phải chiếm obitan cao hơn.

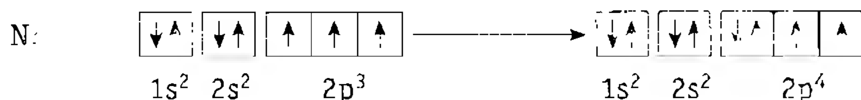
(4) *Ái lực với electron nhóm VA*

Ái lực với electron của các nguyên tố nhóm VA cũng kém âm hơn dự đoán vì chúng phải nhận thêm electron vào cấu hình nửa bão hoà tương đối bền, gây ra tương tác đẩy giữa hai electron trong cùng một obitan. Ví dụ:

$N_{(k)} + e \rightarrow N^-_{(k)}$ $\quad E = +0,27$ eV trong khi đó

$C_{(k)} + e \rightarrow C^-_{(k)}$ $\quad E = -1,12$ eV (nguyên tử C dễ nhận e hơn nguyên tử N).

N:



(5) *Trường hợp của flo*

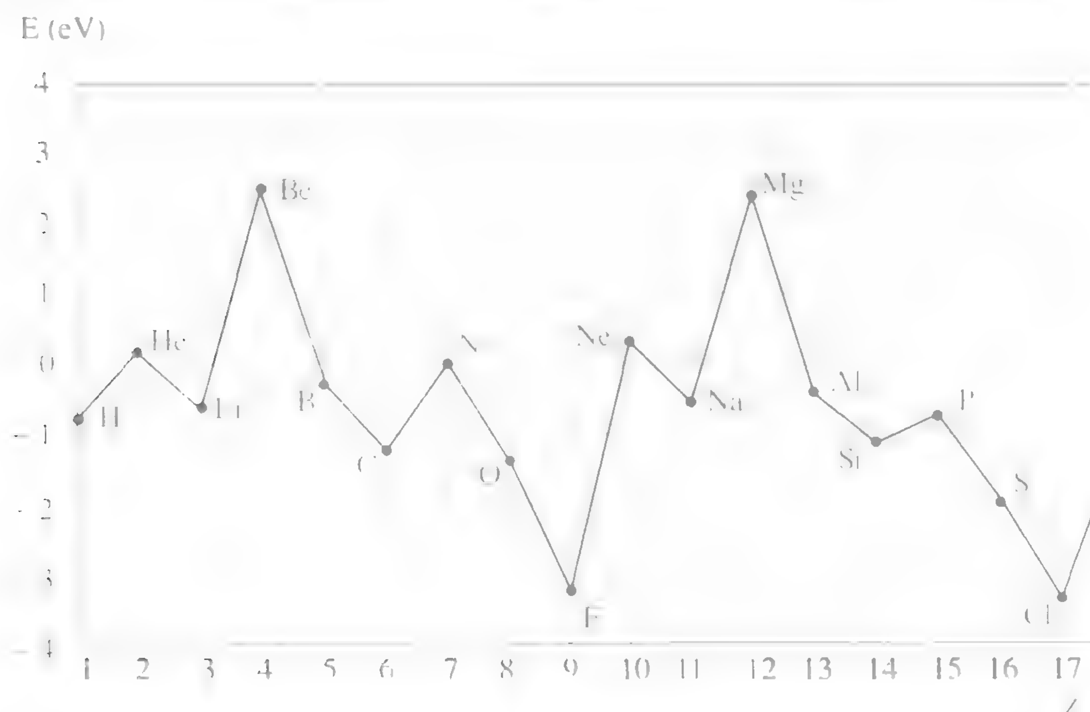
Có điều đáng chú ý là không thể chỉ căn cứ vào trị số ái lực với electron mà kết luận rằng *đơn chất* clo chẳng hạn lại có khả năng oxi hoá mạnh hơn *đơn chất* flo vì quá trình thu thêm một electron của nguyên tử clo toả ra nhiều năng lượng hơn ($E_{Cl} = -3,61$ eV ; $E_F = -3,45$ eV).

Như trên đã nêu, ái lực với electron là năng lượng toả ra khi một *nguyên tử tự do* thu thêm electron, chứ không phải là năng lượng toả ra khi một đơn chất thu thêm electron.

Khi phân li một phân tử flo F_2 thành nguyên tử thì cần ít năng lượng hơn khi phân li một phân tử Cl_2 thành nguyên tử là 0,84 eV; trong khi đó ái lực với electron của flo chỉ kém hơn của clo là 0,16 eV.

Sự chênh lệch đó hoàn toàn đủ bù đắp sự thua kém ái lực với electron của flo trong các phản ứng hoá học, do đó mà đơn chất flo vẫn có tính oxi hoá mạnh hơn đơn chất clo nhiều.

Sở dĩ năng lượng phân li của phân tử clo (và cả brom, iot) lớn là vì liên kết giữa hai nguyên tử trong phân tử là liên kết ba (Cl ≡ Cl), do có thêm hai liên kết phối trí 3p – 3d. Điều đó không xảy ra với flo được vì nguyên tử F không có obitan d.



Hình 3.15. Đồ thị biểu diễn sự biến đổi ái lực với electron của các nguyên tố theo Z

4. ĐỘ ÂM ĐIỆN

Khái niệm *độ âm điện* được L. Pauling (Paoling) đưa vào hoá học từ năm 1932 để *đặc trưng cho khả năng của một nguyên tử trong phân tử hút electron về phía mình*.

Vì độ âm điện là tính chất của *nguyên tử trong phân tử* chứ không phải là của *nguyên tử tự do*, nên việc xác định độ âm điện khó khăn hơn nhiều so với việc xác định năng lượng ion hoá và ái lực với electron.

Có nhiều phương pháp xây dựng các thang độ âm điện; mỗi phương pháp dựa trên một cơ sở lí luận rất khác nhau.

Sau đây trình bày một vài phương pháp tương đối phổ biến.



Hình 3.16. Nhà hoá học Mỹ L. Pauling (1901 – 1994)

Có nhiều công trình về liên kết hoá học và phân tử hữu cơ.

Giải Nobel về hoá học năm 1954.

Giải Nobel hoà bình năm 1962.

4.1. Một số phương pháp xác định độ âm điện

4.1.1. Phương pháp của Pauling

Trên cơ sở thực nghiệm, Pauling nhận xét rằng: trong phân tử AB, nếu liên kết giữa A và B là liên kết cộng hoá trị thuần tuý thì năng lượng của liên kết đơn E_{A-B} bằng trung bình cộng của năng lượng các liên kết đơn E_{A-A} và E_{B-B}.

$$E_{A-B} = \frac{1}{2}(E_{A-A} + E_{B-B})$$

Nhưng thường liên kết A–B là liên kết cộng hoá trị phân cực theo sơ đồ $\overset{+}{A} - B$ hoặc $A - \overset{+}{B}$ và làm cho liên kết có một phần tính chất ion. Các phép tính toán lí thuyết về liên kết hoá học cho biết: năng lượng của liên kết hỗn hợp ion – cộng hoá trị lớn hơn là năng lượng của liên kết cộng hoá trị thuần tuý hoặc của liên kết ion thuần tuý. Năng lượng chênh lệch đó gọi là năng lượng cộng hưởng ion cộng hoá trị, kí hiệu là Δ (đọc là đenta) và được xác định bởi hệ thức:

$$\Delta = E_{A-B} - \frac{1}{2}(E_{A-A} + E_{B-B})$$

Nếu liên kết là cộng hoá trị thuần tuý thì $\Delta = 0$, còn nếu $\Delta \neq 0$ thì ở một mức độ nào đó, liên kết có tính chất ion.

Vì tính chất của liên kết ion phụ thuộc vào sự khác nhau về khả năng hút electron về phía mình (tức là khác nhau về độ âm điện của các nguyên tử tham gia liên kết) nên Δ cũng phụ thuộc vào sự khác nhau đó.

Nếu gọi χ (đọc là khi) là độ âm điện của mỗi nguyên tử thì hiệu số $|\chi_A - \chi_B|$ phải liên quan với Δ theo hệ thức sau do Pauling đề nghị:

$$|\chi_A - \chi_B| = \sqrt{\frac{\Delta}{23,06}} = 0,208\sqrt{\Delta}$$

Δ được biểu thị bằng kcal/mol, độ âm điện bằng eV (1eV = 23,06 kcal/mol)

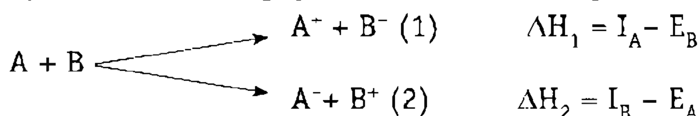
Đối với một nguyên tố bất kì, độ âm điện có thể chọn tuỳ ý. Pauling đề nghị lấy *độ âm điện của flo bằng 4,0 làm trị số chuẩn để so sánh*, từ đó có thể xác định độ âm điện của các nguyên tố khác (nếu biết những dữ kiện về năng lượng liên kết tương ứng). Do đó người ta gọi thang độ âm điện này là *thang tương đối.*

Thang độ âm điện của Pauling hiện nay rất được phổ biến, tuy nhiên nhược điểm của phương pháp này là nhiều dữ kiện về năng lượng liên kết không xác định trực tiếp được (xem bảng 3.13).

4.1.2. Phương pháp của Mulliken (Maliken)

Năm 1934, một nhà hoá học Mĩ khác là Mulliken đã đề nghị một phương pháp tính độ âm điện như sau:

Khi hai nguyên tử của hai nguyên tố A và B hoá hợp với nhau, hai khả năng có thể xảy ra:



$\Delta H_1 = I_A - E_B$

$\Delta H_2 = I_B - E_A$

I và E là năng lượng ion hoá và ái lực với electron của các nguyên tố.

Nếu quá trình (1) xảy ra thì $\Delta H_1 < \Delta H_2$ (theo quy ước nhiệt động học, ΔH_1 âm hơn ΔH_2).

Tức là: $$I_A - E_B \quad < \quad I_B - E_A$$

Hay $$\underbrace{I_A + E_A}_{\chi_A} \quad < \quad \underbrace{I_B + E_B}_{\chi_B}$$

Nguyên tố B hút electron về phía mình mạnh hơn nguyên tố A.

Nếu quá trình (2) xảy ra thì:

$$\chi_A \quad > \quad \chi_B.$$

Nguyên tố A hút electron về phía mình mạnh hơn nguyên tố B.

Vì độ âm điện của một nguyên tố thay đổi theo trạng thái hoá trị của nó (chẳng hạn Cr^{+6} trong ion $Cr_2O_4^{2-}$ hút electron mạnh hơn là Cr^{+3}) nên về sau Mulliken đề nghi công thức để tính độ âm điện của một nguyen tố như sau:

$$\chi^v - \frac{I^v + E^v}{2}$$

Trong đó v chỉ trạng thái hoá trị mà ta đang xét.

Có sự phù hợp rất tốt giữa thang độ âm điện của Mulliken và thang độ âm điện của Pauling. Tương quan giữa các giá trị độ âm điện tính theo Mulliken (χ_M) và các giá trị theo Pauling(χ_P) được thể hiện qua hệ thức sau:

$$\chi_P = 0{,}336\ (\chi_M - 0{,}615)$$

Phương pháp tính độ âm điện theo Mulliken được xem là vừa có cơ sở lí thuyết, vừa có cơ sở thực nghiệm. Trị số χ xác định được không cần so sánh với chuẩn nhu trong thang Pauling, vì vậy người ta gọi thang độ âm điện Mulliken là *thang tuyệt đối.*

4.1.3. Phương pháp của Allred – Rochow (Onrit – Rôsâu)

Allret và Rochow cho rằng độ âm điện là lực hút tĩnh điện giữa hạt nhân nguyen tư và electron nằm xa hạt nhân một khoảng cách của bán kính cộng hoá trị.

$\chi_A = \dfrac{Z_{hd}e^2}{r_A^2}$ Cách tính điện tích hiệu dụng đã nói ơ phần tính năng lượng ion hoá.

Giữa các giá trị độ âm điện theo Pauling và theo *Allred – Rochow* có mối tương quan sau:

$$\chi_{O-R} = 0{,}359\ \frac{Z_{hd}}{r^2} + 0{,}744$$

4.1.4. Ngoài ra, còn các thang độ âm điện khác dựa vào độ phân cực của liên kết, độ dài liên kết, số electron hoá trị và bán kính cộng hoá trị, quang điện... Điều đó chứng tỏ rằng mỗi nguyên tử có khả năng thể hiện nhiều mức độ âm điện khac nhau tuỳ theo điều kiện hình thành liên kết. Tuy nhiên chưa có phương pháp nao hoàn hảo.

Nhìn chung, dù các phương pháp tính toán độ âm điện có khác nhau nhưng trình tự biến đổi độ âm điện của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn nói chung là phù hợp với nhau. Độ âm diện lớn nhất là của flo rồi đến oxi, rồi nitơ; nhỏ nhất là độ âm điện của xesi.

4.1.5. Độ âm điện của nhóm

Từ sự lưu ý đến trạng thái hoá trị của các nguyên tử khi tính độ âm điện, gần đây các nhà hoá học đưa ra khái niệm độ âm điện của các nhóm nguyên tử như CH_3, CF_3, C_2H_5v,v... cùng các phương pháp xác định độ âm điện của nhóm.

Do số lượng các nhóm nhiều hơn hẳn số lượng các nguyên tử riêng lẻ nen phạm vi áp dụng độ âm điện nhóm được mở rộng hơn.

Dưới đây ghi độ âm điện một số ít nhóm thường gặp. Trị số độ âm điện nhóm cũng được biểu thị không có đơn vị như thang của Pauling.

Bảng 3.12. Độ âm điện của một số nhóm thường gặp

Thứ tự	Công thức nhóm	Độ âm điện	Thứ tự	Công thức nhóm	Độ âm điện
1	CH_3	2,27	11	NH_2	2,61
2	C_2H_5	2,28	12	NF_2	3,64
3	$(CH_3)_2CH$	2,28	13	NCl_2	3.14
4	CH_2F	3,46	14	NBr_2	2,85
5	CHF_2	3,73	15	OH	3,22
6	CF_3	4,03	16	OF	4,14
7	CH_2Cl	2.47	17	OCl	3,73
8	$CHCl_2$	2,66	18	OBr	2,40
9	CCl_3	2,84	19	$CH = CH_2$	2,75
10	CBr_3	2,59	20 ...	C = CH ...	4,84 ...

Bảng 3.11. Độ âm điện của các nguyên tố

– Các số in đậm là các giá trị tính theo công thức của Allred Rochow.

– Các số in nghiêng – theo phương pháp của Pauling.

– Các số còn lại – theo phương pháp của Mulliken.

Các số La Mã ghi trên đầu bảng chỉ bậc oxi hoá của nguyên tử, được dùng để tính độ âm điện theo Pauling.

I	II	III	IV	II	II	II	II	II	II	I	II	III	IV	III	II	I***
H 2,20																
Li **0,97** *0,98* 0,94	Be **1,47** *1,57* 1,46											B **2,01** *2,04* 2,01	C **2,50** *2,55* 2,63	N **3,07** *3,04* 2,33	O **3,50** *3,44* 3,17	F **4,10** *3,98* 3,91
Na **1,01** 0,93 0,93	Mg **1,23** *1,31* 1,32											Al **1,47** *1,61* 1,81	Si **1,74** *1,90* 2,44	P **2,06** *2,19* 1,81	S **2,44** 2,58 2,41	Cl **2,83** *3,16* 3,00
K **0,91** *0,82* 0,80	Ca **1,04** *1,00*	Sc **1,20** *1,36*	Ti **1,32** *1,54*	V **1,45** *1,63*	Cr **1,56** *1,66*	Mn **1,60** *1,55*	Fe **1,64** *1,83*	Co **1,70** *1,88*	Ni **1,75** *1,91*	Cu **1,75** *1,90* 1,36	Zn **1,66** *1,65* 1,49	Ga **1,82** *1,81* 1,95	Ge **2,02** *2,01*	As **2,20** *2,18* 1,75	Se **2,48** 2,55 2,23	Br **2,74** 2,96 2,76
Rb **0,89** *0,82*	Sr **0,99** *0,95*	Y **1,11** *1,22*	Zr **1,22** *1,33*	Nb **1,23**	Mo **1,30** *2,16*	Tc **1,36**	Ru **1,42**	Rh **1,45** 2,28	Pd **1,35** 2,20	Ag **1,42** *1,93* 1,36	Cd **1,46** *1,69* 1,4	In **1,49** *1,78* 1,80	Sn **1,72** *1,96*	Sb **1,82** *2,05* 1,65	Te **2,01**	I **2,21** 2,66 2,56
Cs **0,86** *0,79*	Ba **0,97** *0,89*	(a)	Hf **1,23**	Ta **1,33**	W **1,40** 2,36	Re **1,46**	Os **1,52**	Ir **1,55** 2,20	Pt **1,44** 2,28	Au **1,42** 2,54	Hg **1,44** 2,00	Tl **1,44** *2,04*	Pb **1,55** 2,33	Bi **1,67** *2,02*	Po **1,76**	At **1,96**
Fr **0,86**	Ra **0,97**	(b)														
		aLa **1,08** *1,10*	Ce **1,06** *1,12*	Pr **1,07** *1,13*	Nd **1,07** 1,14	Pm **1,07**	Sm **1,07** 1,17	Eu **1,01**	Gd **1,11** 1,20	Tb **1,10**	Dy **1,10** *1,22*	Ho **1,10** *1,23*	Er **1,11** *1,24*	Tm **1,11** *1,25*	Yb **1,06**	Lu **1,14** *1,27*
		bAc **1,00**	Th **1,11**	Pa **1,14**	U **1,22** *1,38*	Np **1,22** *1,36*	Pu **1,22** *1,28*	Am **≈1,2**	Cm **≈1,2**	Bk **≈1,2**	Cf **≈1,2**	Es **≈1,2**	Fm **≈1,2**	Md **≈1,2**		

Bảng 3.13. Độ âm điện của các nguyên tố (thang Pauling)

1 H 2,1																
3 Li 1,0	4 Be 1,5											5 B 2,0	6 C 2,5	7 N 3,0	8 O 3,5	9 F 4,0
11 Na 1,0	12 Mg 1,2											13 Al 1,5	14 Si 1,8	15 P 2,1	16 S 2,5	17 Cl 3,0
19 K 0,9	20 Ca 1,0	21 Sc 1,3	22 Ti 1,4	23 V 1,5	24 Cr 1,6	25 Mn 1,6	26 Fe 1,7	27 Co 1,7	28 Ni 1,8	29 Cu 1,8	30 Zn 1,6	31 Ga 1,7	32 Ge 1,9	33 As 2,1	34 Se 2,4	35 Br 2,8
37 Rb 0,9	38 Sr 1,0	39 Y 1,2	40 Zr 1,3	41 Nb 1,5	42 Mo 1,6	43 Tc 1,7	44 Ru 1,8	45 Rh 1,8	46 Pd 1,8	47 Ag 1,6	48 Cd 1,6	49 In 1,6	50 Sn 1,8	51 Sb 1,9	52 Te 2,1	53 I 2,5
55 Cs 0,8	56 Ba 1,0	57 La 1,1	72 Hf 1,3	73 Ta 1,4	74 W 1,5	75 Re 1,7	76 Os 1,9	77 Ir 1,9	78 Pt 1,8	79 Au 1,9	80 Hg 1,7	81 Tl 1,6	82 Pb 1,7	83 Bi 1,8	84 Po 1,9	85 At 2,1
87 Fr 0,8	88 Ra 1,0	89 Ac 1,1														

4.2. Sự biến đổi độ âm điện của các nguyên tố

Bảng 3.13 ghi độ âm điện của các nguyên tố (theo thang Pauling) trừ các nguyên tố đất hiếm (có độ âm điện khoảng 1,3).

Flo là nguyên tố có độ âm điện lớn nhất (4,0), sau đó là oxi (3,5), đứng thứ ba là clo (3,07) và nitơ (3,0).

Xesi là nguyên tố bền có độ âm điện nhỏ nhất (0,8).

Hiđro và các phi kim khác chiếm vị trí trung gian trong thang đó, trị số độ âm điện của chúng vào khoảng 2 và lớn hơn. Các kim loại có độ âm điện nhỏ hơn 2.

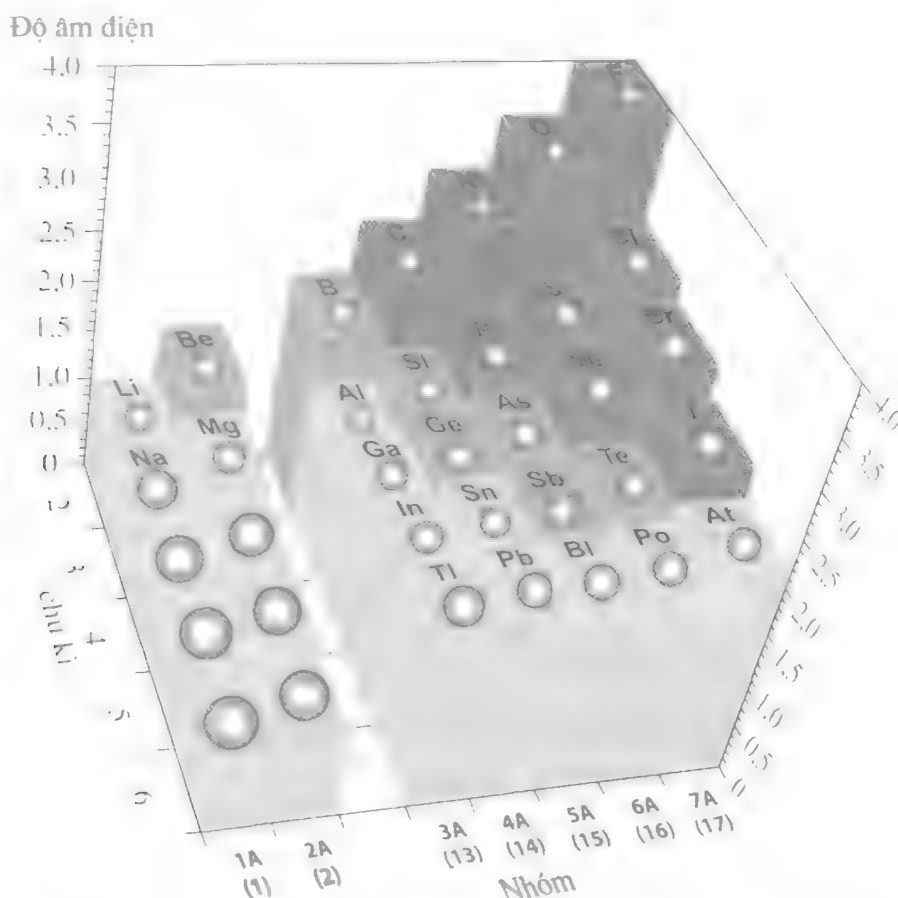
Qua bảng độ âm điện của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn, ta nhận thấy:

– Trong một nhóm A, theo chiều từ trên xuống dưới, độ âm điện của các nguyên tố giảm dần.

- Trong một chu kì, độ âm điện tăng dần từ trái qua phải. Sự biến đổi mạnh nhất về độ âm điện diễn ra ở chu kì 2 (Li ... F).

- Đối với dãy nguyên tố chuyển tiếp, độ âm điện tăng dần khi điện tích hạt nhân tăng.

Hình 3.17 dưới đây trình bày sự biến đổi độ âm điện của các nguyên tố nhóm A theo điện tích hạt nhân Z.



Hình 3.17. Sự biến đổi độ âm điện của các nguyên tố nhóm A theo Z

4.3. Sử dụng thang độ âm điện

Các trị số độ âm điện được sử dụng để nghiên cứu một cách định tính một số tính chất của phân tử, chẳng hạn sự phân bố mật độ electron trong phân tử, độ bền của liên kết hoá học v.v...

4.3.1. Phân bố mật độ electron trong phân tử

Liên kết giữa các nguyên tử có độ âm điện khác xa nhau thì phân cực mạnh (có nhiều tính chất ion), còn liên kết giữa các nguyên tử có độ âm điện gần nhau thì chủ yếu có tính chất cộng hoá trị.

Một số tác giả (như Pauling) đề nghị một tỉ lệ gần đúng giữa tính chất ion của liên kết đơn và hiệu số độ âm điện giữa hai nguyên tử đó như sau:

Bảng 3.14 dưới đây ghi hiệu số độ âm điện của các nguyên tố và % tính chất ion của liên kết (không áp dụng đối với hiđro).

Bảng 3.14. Hiệu số độ âm điện của nguyên tố A và B ($\chi_A - \chi_B$) và % tính chất ion của liên kết A–B

$\chi_A - \chi_B$	% tính chất ion	$\chi_A - \chi_B$	% tính chất ion
0,0	0	1,4	32
0,2	1	1,6	40
0,4	3	1,8	47
0,6	7	2,0	54
0,8	12	2,2	61
1,0	18	2,4	68
1,2	25	2,6	74

Gần đây, nhà hoá học Mĩ Allen cho rằng tỉ số: hiệu số độ âm điện của hai nguyên tử trong phân tử ($\Delta\chi$) và tổng số độ âm điện của chúng ($\Sigma\chi$) cho phép đánh giá độ phân cực của liên kết gần với thực tế hơn.

$$\frac{\Delta\chi}{\Sigma\chi} = \frac{(\chi_A - \chi_B)}{(\chi_A + \chi_B)}$$

Tỉ số trên có giới hạn từ 0 đến 1.

Nếu tỉ số có giá bằng 0 thì liên kết thuần tuý cộng hoá trị.

Nếu tỉ số bằng 1 thì liên kết là ion thuần tuý.

Chẳng hạn tổ hợp CsF có độ phân cực rất cao (gần như ion) :

$$\frac{\Delta\chi}{\Sigma\chi} = \frac{(4,0 - 0,8)}{(4 + 0,8)} = 0,67$$

4.3.2. Xác định gần đúng độ bền của liên kết

Nếu hiệu số độ âm điện giữa hai nguyên tố càng lớn thì liên kết giữa chúng càng bền và nói chung, phản ứng toả nhiệt càng mạnh. Phản ứng giữa hai nguyên tố có độ âm điện càng gần nhau thì càng ít toả nhiệt hoặc có khi thu nhiệt; liên kết giữa chúng càng kém bền.

Ví dụ:



$H_2 + F_2 \rightarrow 2HF \quad \Delta H = -542,2$ kJ



$H_2 + Cl_2 \rightarrow 2HCl \quad \Delta H = -184,62$ kJ



$H_2 + Br_2 \rightarrow 2HBr \quad \Delta H = -72,80$ kJ



$H_2 + I_2 \rightarrow 2HI \quad \Delta H = +53,0$ kJ

Như trên đã nói, độ âm điện của một nguyên tố không phải là một hằng số đặc trưng cho nguyên tử cô lập mà phụ thuộc vào trạng thái hoá trị của nguyên tố, vào bản chất của phân tử trong đó nguyên tố đó tham gia vào việc hình thành liên kết.

Chẳng hạn, nguyên tử H tự do và nguyên tử hiđro trong các phân tử H_2, H_2O không có tính chất như nhau, nguyên tử mangan trong các hợp chất $Mn(OH)_2$, MnO_2, MnO_4 v.v... có khả năng hút electron khác nhau...

Như vậy, mỗi nguyên tố có khả năng thể hiện một số trị số độ âm điện khác nhau tuỳ thuộc vào những điều kiện hình thành liên kết hoá học. Tuy nhiên, cho đến nay vẫn chưa có thang độ âm điện nào phản ánh được điều đó.

5. THẾ ĐIỆN CỰC

Khả năng oxi hoá – khử của các chất có liên quan đến năng lượng ion hoá, ái lực electron, độ âm điện của các nguyên tố.

Chẳng hạn, nguyên tử flo có độ âm điện lớn, là chất có khuynh hướng nhận electron rất mạnh. Hơn nữa phân tử flo rất dễ bị phân li để tạo thành nguyên tử flo nên ta có thể hiểu tại sao flo là chất oxi hoá mãnh liệt.

Clo là nguyên tố có độ âm điện nhỏ hơn, phân tử lại bền hơn nên clo là chất oxi hoá kém mãnh liệt hơn flo. Đối với nhiều phi kim khác, ta cũng có thể dự đoán một cách tương tự.

Đối với các chất khử, ta cũng có thể phán đoán được khả năng khử của chúng. Ví dụ, các kim loại kiềm và kiềm thổ là những nguyên tố có năng lượng ion hoá nhỏ, các đơn chất lại dễ nóng chảy, dễ bay hơi thành nguyên tử, do đó chúng là những chất khử điển hình.

Tuy vậy, tất cả những điều nói trên chỉ là những phán đoán định tính. Hơn nữa, năng lượng ion hoá, ái lực với electron, độ âm điện chỉ là thước đo khả năng mất hay nhận electron của *nguyên tử* (ở trạng thái tự do hay trong phân tử) chứ không phải của *đơn chất hay hợp chất.*

Để đánh giá định lượng khả năng oxi hoá – khử của các chất trong dung dịch nước, người ta dựa vào thế điện cực của chúng.

5.1. Điện cực. Thế điện cực

Như ta đã biết, một thanh kim loại M nhúng vào dung dịch chứa ion M^{n+} của nó tạo thành một điện cực của một pin điện hoá. Giữa bề mặt tiếp xúc của kim loại và dung dịch hình thành một lớp điện kép, từ đó phát sinh một hiệu số điện thế. Người ta gọi hiệu thế đó là *thế điện cực* của một cặp oxi hoá – khử $M_{(rắn)}/ M^{n+}_{(dung\ dịch)}$.

Độ lớn của thế điện cực phụ thuộc vào bản chất của kim loại, nhiệt độ và nồng độ của các ion trong dung dịch.

Nếu ở điều kiện nồng độ của các ion bằng đơn vị, nhiệt độ là 25°C thì thế hiệu đó được gọi là thế *điện cực chuẩn* và được kí hiệu là: $E^0_{M(r)/M^{n+}_{aq}}$

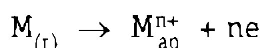
Bây giờ ta xét xem những yếu tố nào quy định thế điện cực (E) và trong đó năng lượng ion hoá có vai trò như thế nào.

Ta đã biết rằng, thế điện cực E liên quan trực tiếp với sự biến đổi năng lượng tự do ΔG theo hệ thức:

$\Delta G = -nFE = \Delta H - T\Delta S$ (trong đó F là số faraday; n là số electron trao đổi).

Nếu bỏ qua sự biến đổi entropi thì $\Delta G \approx \Delta H$.

Chẳng hạn, đối với bán nguyên tố kim loại/ion kim loại trong môi trường nước [$M(r)/M^{n+}.aq$], sức điện động của nó tỉ lệ với sự biến đổi năng lượng tự do của phản ứng.



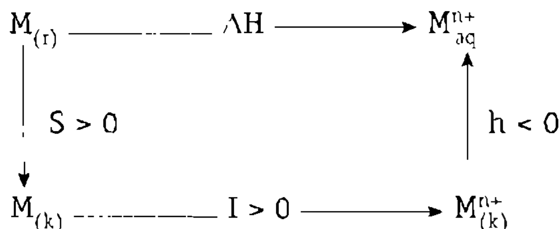
$$M_{(r)} \rightarrow M^{n+}_{aq} + ne$$

ΔH của phản ứng biến đổi một kim loại từ trạng thái rắn sang ion trong dung dịch (ion hiđrat hoá) có thể xác định theo chu trình Born - Haber (Booc – Habơ) gồm ba giai đoạn:

Sự thăng hoa của kim loại (biến đổi từ trạng thái rắn sang trạng thái khí). Đó là quá trình thu nhiệt. Năng lượng thăng hoa (được kí hiệu là S) và S(1) > 0.

– Sự ion hoá nguyên tử kim loại (ở trạng thái khí). Năng lương ion hoá kí hiệu là I và I > 0.

– Sự hiđrat hoá ion kim loại. Đó là quá trình toả nhiệt. Năng lượng hiđrat hoá (kí hiệu là h) và h < 0.

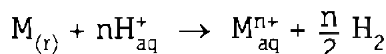


Sơ đồ trên biểu diễn chu trình Born - Haber đối với anot M/M^{n+} (một điện cực của pin điện hoá, nơi xảy ra quá trình oxi hoá).

Đối với catot (nơi xảy ra quá trình khử), ta cũng xây dựng một chu trình tương tự.

Từ những điều trình bày trên, có thể viết: $\Delta H = S + I - h$.

Vì không đo trực tiếp được thế của từng điện cực riêng rẽ (thế tuyệt đối) nên phải đo với điện cực hiđro và vì vậy thế đó gắn liền với sự biến đổi năng lượng tự do ΔG của phản ứng:



$$M_{(r)} + nH^+_{aq} \rightarrow M^{n+}_{aq} + \frac{n}{2} H_2$$

(1) S là chữ đầu của từ Sublimation có nghĩa là thang hoa.

Nếu bỏ qua sự biến đổi entropi, thì ΔG của phản ứng: $\Delta G_{pư} \approx \Delta H_{pư}$

Theo định luật Hess thì:

$\Delta H_{pư} = \Delta H_{\text{tạo thành chất cuối}} - \Delta H_{\text{tạo thành chất đầu}}$

$\Delta H_{pư} = \Delta H_{tt}\ (M^{n+}.aq) - \Delta H_{tt}\ (H^{+}.aq)$ $\quad \Delta H_{tt}$ đơn chất = 0 (ΔH_{tt} là $\Delta H_{\text{tạo thành}}$)

– Ở trên ta đã biết $\Delta H_{tt}\ (M^{n+}.aq) = S_M + I_M - h_{M^{n}} - h_{M^{n+}}$

– $\Delta H_{tt}\ (H^{+}.aq)$ cũng được xác định theo chu trình Born – Haber, gồm ba giai đoạn:

+ Sự phân li phân tử H_2 thành nguyên tử. Năng lượng phân li D > 0

+ Sự ion hoá nguyên tử H. Năng lượng ion hoá I > 0

+ Sự hiđrat hoá ion H^+. Năng lượng hiđrát hoá $h_H < 0$.

Như vậy, nếu bỏ qua sự biến đổi entropi, thì thế điện cực tiêu chuẩn đối với bán nguyên tố $M/M^{n+}.aq$ sẽ bằng:

$$\Delta G^0 = -nFE^0 \approx \Delta H^0_{pư}$$

hay $$E^0_{M/M^{n+}.aq} = -\frac{\Delta H^0_{pư}}{nF}$$

hay $$E^0_{M/M^{n+}.aq} = \frac{1}{nF}\left[\left(1/2nD_{H_2} + nI_H - nh_{H^+}\right) - \left(I_M + S_M - h_{M^{n+}}\right)\right]$$

Ở đây n =1; các dữ kiện nhiệt động (S, D, h...) đều tính theo eV. (NeV = 23000cal/mol; N: số Avogadro; Ne = F (số Faraday), E^0 tính ra Von).

Nếu lấy các giá trị: $D_{H_2} = 4{,}48$ eV, $I_H = 13{,}60$ eV, $h_{H^+} = 11{,}18$ eV, có thể đánh giá gần đúng thế điện cực của các kim loại kiềm, chẳng hạn đối với liti:

$$E^0_{Li/Li^+_{aq}} = (\frac{1}{2} \times 4{,}48 + 13{,}60 - 11{,}18) - (5{,}39 + 1{,}61 - 5{,}34) = 3{,}0\ V.$$

Kết quả trên phù hợp tốt với giá trị xác định bằng thực nghiệm, $E^0 = 3{,}045V$.

5.2. Bảng thế điện cực

Người ta đã xác định được bằng thực nghiệm điện thế của nhiều quá trình xảy ra trên điện cực.

Thế ứng với quá trình oxi hoá là thế oxi hoá, nó đặc trưng định lượng cho khả năng *nhường electron* của dạng khử để chuyển thành dạng oxi hoá.

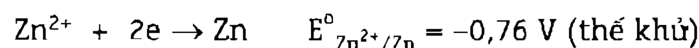
Ví dụ phản ứng xảy ra trên điện cực là phản ứng *oxi hoá* kẽm.



$Zn \rightarrow Zn^{2+} + 2e$ $\qquad E^0_{Zn/Zn^{2+}} = +0{,}76$ V (thế oxi hoá)

Thế ứng với quá trình khử là thế khử, nó đặc trưng định lượng cho khả năng *nhận electron* của dạng oxi hoá để chuyển thành dạng khử.

Ví dụ phản ứng xảy ra trên điện cực là phản ứng *khử* ion Zn^{2+}:



$Zn^{2+} + 2e \rightarrow Zn$ $\qquad E^0_{Zn^{2+}/Zn} = -0{,}76$ V (thế khử)

Thế oxi hoá và thế khử của một cặp oxi hoá - khử bằng nhau về trị số và ngược dấu nhau.

Bảng 3.15 dưới đây trình bày *thế khử chuẩn* của một số cặp oxi hoá – khử trong dung dịch nước $[H_3O^+] = 1$ mol/l.

Thế khử chuẩn *càng âm* thì chất *khử càng mạnh*.

Thế khử chuẩn *càng dương* thì chất *oxi hoá càng mạnh.*

Trong bảng trên, thế khử chuẩn của cặp Li^+/Li có giá trị âm nhất (liti là chất khử mạnh nhất ở điều kiện chuẩn) được xếp ở đầu bảng; thế điện cực của cặp $F_2/2F^-$ có giá trị dương nhất (F_2 là chất oxi hoá mạnh nhất) được xếp ở cuối bảng.

Bảng 3.15. Thế điện cực chuẩn (298K)

Bán phản ứng	**E^0 (V)**
$F_{2(k)} + 2e \rightleftharpoons 2F^-_{(aq)}$	+2,87
$O_{3(k)} + 2H^+_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons O_{2(k)} + H_2O_{(l)}$	+2,07
$Co^{3+}_{(aq)} + e \rightleftharpoons Co^{2+}_{(aq)}$	+1,82
$H_2O_{2(aq)} + 2H^+_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons 2H_2O_{(l)}$	+1,77
$PbO_{2(r)} + 4H^+_{(aq)} + SO^{2-}_{4(aq)} + 2e \rightleftharpoons PbSO_{4(r)} + 2H_2O(l)$	+1,70
$Ce^{4+}_{(aq)} + e \rightleftharpoons Ce^{3+}_{(aq)}$	+1,61
$MnO^-_{4(aq)} + 8H^+_{(aq)} + 5e \rightleftharpoons Mn^{2+}_{(aq)} + 4H_2O_{(l)}$	+1,51
$Au^{3+}_{(aq)} + 3e \rightleftharpoons Au_{(r)}$	+1,50
$Cl_{2(k)} + 2e \rightleftharpoons 2Cl^-_{(aq)}$	+1,36
$Cr_2O^{2-}_{7(aq)} + 14H^+_{(aq)} + 6e \rightleftharpoons 2Cr^{3+}_{(aq)} + 7H_2O_{(l)}$	+1,33
$MnO_{2(r)} + 4H^+_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Mn^{2+}_{(aq)} + 2H_2O_{(l)}$	+1,23
$O_{2(k)} + 4H^+_{(aq)} + 4e \rightleftharpoons 2H_2O_{(l)}$	+1,23
$Br_{2(l)} + 2e \rightleftharpoons 2Br^-_{(aq)}$	+1,07
$NO^-_{3(aq)} + 4H^+_{(aq)} + 3e \rightleftharpoons NO_{(k)} + 2H_2O_{(l)}$	+0,96
$2Hg^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Hg^{2+}_{2(aq)}$	+0,92
$Hg^{2+}_{2(aq)} + 2e \rightleftharpoons 2Hg_{(l)}$	+0,85
$Ag^+_{(aq)} + e \rightleftharpoons Ag_{(r)}$	+0,80
$Fe^{3+}_{(aq)} + e \rightleftharpoons Fe^{2+}_{(aq)}$	+0,77
$O_{2(k)} + 2H^+_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons H_2O_{2(aq)}$	+0,68
$MnO^-_{4(aq)} + 2H_2O_{(l)} + 3e \rightleftharpoons MnO_{2(r)} + 4OH^-_{(aq)}$	+0,59

Bán phản ứng	**E^0 (V)**
$I_{2(r)} + 2e \rightleftharpoons 2I^-_{(aq)}$	+0,53
$O_{2(k)} + 2H_2O_{(l)} + 4e \rightleftharpoons 4OH^-_{(aq)}$	+0,40
$Cu^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Cu_{(r)}$	+0,34
$AgCl_{(r)} + e \rightleftharpoons Ag_{(r)} + Cl^-_{(aq)}$	+0,22
$SO^{2-}_{4(aq)} + 4H^+_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons SO_{2(k)} + 2H_2O_{(l)}$	+0,20
$Cu^{2+}_{(aq)} + e \rightleftharpoons Cu^+_{(aq)}$	+0,15
$Sn^{4+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Sn^{2+}_{(aq)}$	+0,13
$2H^+_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons H_{2(k)}$	0,00
$Pb^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Pb_{(r)}$	–0,13
$Sn^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Sn_{(r)}$	–0,14
$N_{2(k)} + 5H^+_{(aq)} + 4e \rightleftharpoons N_2H^+_{5(aq)}$	0,23
$Ni^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Ni_{(r)}$	–0,25
$Co^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Co_{(r)}$	–0,28
$PbSO_{4(r)} + 2e \rightleftharpoons Pb_{(r)} + SO^{2-}_{4(aq)}$	–0,31
$Cd^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Cd_{(r)}$	–0,40
$Fe^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Fe(r)$	–0,44
$Cr^{3+}_{(aq)} + 3e \rightleftharpoons Cr_{(r)}$	–0,74
$Zn^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Zn_{(r)}$	–0,76
$2H_2O_{(l)} + 2e \rightleftharpoons H_{2(k)} + 2OH^-_{(aq)}$	0,83
$Mn^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Mn_{(r)}$	–1,18
$Al^{3+}_{(aq)} + 3e \rightleftharpoons Al_{(r)}$	–1,66
$Mg^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Mg_{(r)}$	–2,37
$Na^+_{(aq)} + e \rightleftharpoons Na_{(r)}$	–2,71
$Ca^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Ca_{(r)}$	–2,87
$Sr^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Sr_{(r)}$	–2,89
$Ba^{2+}_{(aq)} + 2e \rightleftharpoons Ba_{(r)}$	–2,90
$K^+_{(aq)} + e \rightleftharpoons K_{(r)}$	–2,93
$Li^+_{(aq)} + e \rightleftharpoons Li_{(r)}$	–3,05

5.3. Sự biến đổi thế điện cực của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn

Bảng 3.16 dưới đây trình bày bảng giá trị các dữ kiện về năng lượng ion hoá và thế khử chuẩn của các nguyên tố nhóm IA và IIA.

Bảng 3.16. Năng lượng ion hoá và thế khử chuẩn của các nguyên tố nhóm IA và IIA

Nhóm IA

Nguyên tố	I, eV	–h, eV	S, eV	$E^0(M^+ + e \rightarrow M)V$
Li	5,39	5,34	1,61	–3,045
Na	5,14	4,21	1,13	–2,714
K	4,34	3,34	0,93	–2,925
Rb	4,18	3,04	0,89	–2,925
Cs	3,89	2,74	0,82	–2,923

Nhóm IIA

Nguyên tố	I, eV	–h, eV	S, eV	$E^0(M^{2+} + 2e \rightarrow M)V$
Be	27,5	24,8	3,33	1,85
Mg	22,6	20,2	1,56	–2,37
Ca	18,0	16,6	2,00	–2,87
Sr	16,7	15,2	1,70	–2,89
Ba	15,2	13,7	1,82	–2,90

Nhận xét 1

Trong bảng thế khử chuẩn, $E^o_{Li^+/Li}$ có giá trị âm nhất (chất khử mạnh nhất).

Nếu chỉ dựa vào các dữ kiện về năng lượng ion hoá (I) và năng lượng thăng hoa (S), có thể nghĩ rằng liti là chất khử yếu nhất so với các kim loại kiềm khác. Song thế khử của nó lại có giá trị âm nhất.

Tính chất "bất thường" đó của liti là do nó có năng lượng hiđrat hoá lớn. Ta biết rằng:

$\Delta G_{sonvat} = -\dfrac{NZ^2_{ion}e^2}{2r}(1 - \dfrac{1}{\varepsilon})$ trong đó ε là hằng số điện môi của dung môi.

+ ΔG tỉ lệ với bình phương điện tích của ion, tỉ lệ nghịch với bán kính ion.

+ ε càng lớn, ΔG càng âm ($\varepsilon_{H_2O} = 84$; $\varepsilon_{HCH_3COO} = 57$; $\varepsilon_{C_2H_5OH} = 21$; $\varepsilon_{C_6H_6} = 2,5$). $\Delta G_{hidrat\ hoa}$ của ion Li^+ rất âm là do r nhỏ, nói đúng hơn Li^+ có mật độ điện tích $(\frac{Z}{r})$ lớn.

Nhận xét 2

Trường hợp kim loại yếu (có năng lượng ion hoá lớn) được xếp trước kim loại mạnh (có năng lượng ion hoá nhỏ hơn) trong dãy hoạt động hoá học (kim loại có thế khử âm hơn được xếp trước kim loại có thế khử kém âm hơn) không phải là những trường hợp riêng biệt. Trường hợp đó khá phổ biến, đặc biệt là đối với các nguyên tố chuyển tiếp.

Bảng dưới đây xếp một số kim loại theo thứ tự hoạt động (kim loại đứng trước (có thế khử âm hơn) đẩy kim loại đứng sau ra khỏi dung dịch muối của nó có nồng độ 1M).

	Zn	Fe	Sn	Pb	H	Cu
I_1(eV)	9,39	7,90	7,33	7,41	13,6	7,72
I_2(eV)	17,96	16,18	14,63	15,02		20,29
$E^0_{M^{n+}/M}$ (V)	–0,76	–0,44	–0,13	–0,12	0	+0,34

Nhận xét 3

Khuynh hướng chung biến đổi thế khử của các nguyên tố là do sự biến đổi các đại lượng quy định thế khử (S, I, h) quyết định.

Bảng (3.17) cho ta thấy *có sự biến đổi tuần hoàn rõ rệt:*

Bảng 3.17. Sự biến đổi tuần hoàn của thế khử chuẩn

	Nhóm IA	Nhóm IIA	Nhóm IIIB
Chu kì 3	Na^+/Na	Mg^{2+}/Mg	Al^{3+}/Al
E^0	–2,714	–2,37	–1,66
Chu kì 4	K^+/K	Ca^{2+}/Ca	Sc^{3+}/Sc
E^0	–2,925	–2,87	–2,08
Chu kì 5	Rb^+/Rb	Sr^{2+}/Sr	Y^{3+}/Y
E^0	–2,925	–2,89	–2,37
Chu kì 6	Cs^+/Cs	Ba^{2+}/Ba	La^{3+}/La
E^0	–2,923	–2,90	–2,52

– *Trong một chu kì:* theo chiều từ trái sang phải, thế khử kém âm dần (tính khử giảm dần) chủ yếu là do sự tăng năng lượng ion hoá của các nguyên tử và sự tăng số electron bị tách ra.

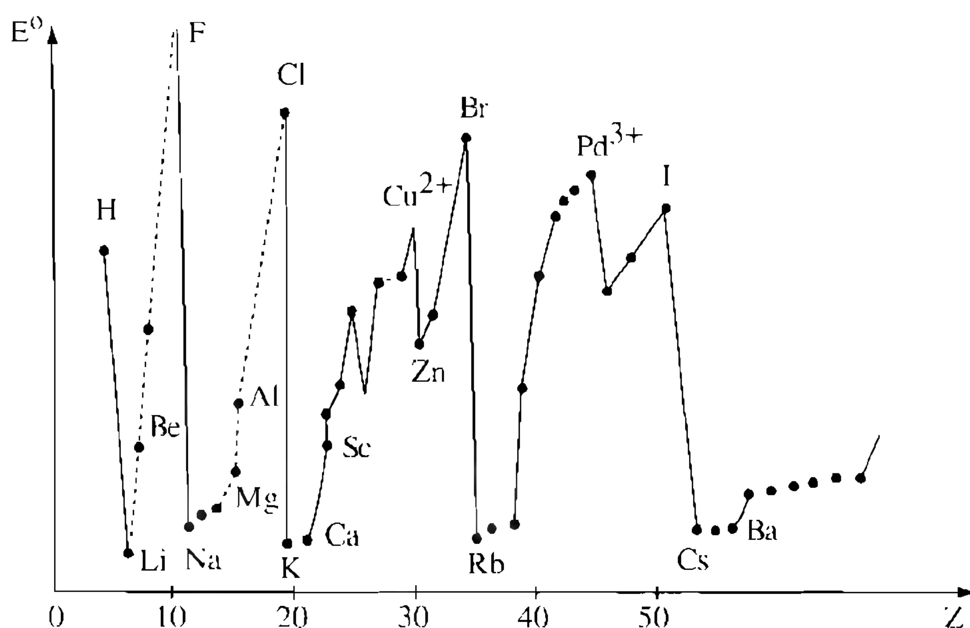
– *Trong một nhóm:* nói chung, theo chiều từ trên xuống dưới, thế khử ngày càng âm (tính khử ngày càng tăng) chủ yếu là do sự giảm năng lượng ion hoá.

Tuy nhiên, điều đó không phải xảy ra đối với tất cả các nhóm trong hệ thống tuần hoàn, chẳng hạn đối với nhóm IIIA, thế khử chuẩn của các nguyên tố biến đổi ngược lại so với các nhóm IA, IIA.

Bảng 3.18. Các dữ kiện năng lượng và thế khử của các nguyên tố nhóm IIIA

Nguyên tố	I,eV	–h,eV	S,eV	$E^0_{(M^{3+}+3e \to M)}$,V
Al	53,3	48,7	3,3	–1,66
Ga	57,3	48,8	2,9	–0,53
In	52,7	43,2	2,5	–0,343
Tl	56,4	42,7	1,8	+0,720

– Đồ thị biểu diễn sự biến đổi thế khử chuẩn E^0 theo điện tích hạt nhân Z :



Hình 3.18. Sự biến đổi thế khử chuẩn của các nguyên tố theo chiều tăng điện tích hạt nhân

Qua đồ thị trên ta thấy sự biến đổi thế điện cực của các nguyên tố có tính tuần hoàn rõ rệt.

– Các cực tiểu chính là các kim loại kiềm.

– Các cực đại chính là các halogen.

Nếu so sánh với đồ thị biểu diễn sự biến đổi năng lượng ion hoá theo chiều tăng của điện tích hạt nhân ta thấy, nhìn chung có sự tương đồng:

– Các kim loại mạnh có năng lượng ion hoá nhỏ thì có thế điện cực âm hơn.

– Các phi kim mạnh, có năng lượng ion hoá lớn thì có thế điện cực dương hơn.

Tuy vậy, không có sự trùng lặp hoàn toàn bởi vì thế điện cực của một nguyên tố chẳng những phụ thuộc vào năng lượng ion hoá mà còn phụ thuộc vào nhiều yêu tố khác như đã xét ở trên.

6. HOÁ TRỊ. SỐ OXI HOÁ

6.1. Khái niệm về hoá trị và khái niệm về số oxi hoá

Ta đã biết, có hai kiểu liên kết hoá học cơ bản: liên kết điện hoá trị hay liên kết ion và liên kết cộng hoá trị (không cực, có cực, bán cực). Liên kết kim loại vừa mang tính chất ion vừa mang tính chất cộng hoá trị. Mỗi kiểu liên kết được đặc trưng bằng một lực liên kết riêng: lực tĩnh điện đặc trưng cho liên kết ion; lực trao đổi đặc trưng cho liên kết cộng hoá trị.

Hoá trị của một nguyên tố đặc trưng cho khả năng của nguyên tử của nguyên tố đó có thể tạo thành một số liên kết hoá học nhất định. Hoá trị thường gắn liền với một kiểu liên kết cụ thể.

Điện hoá trị được xác định bằng số electron mà một nguyên tử mất đi hay thu vào khi tạo thành ion đơn. Đó là điện tích của các ion trong các hợp chất ion. Chẳng hạn, trong phân tử $CaCl_2$, nguyên tử canxi có điện hoá trị 2+, nguyên tử clo có điện hoá trị 1−.

Cộng hoá trị được xác định bằng số liên kết cộng hoá trị do các nguyên tử trong phân tử tạo thành. Nói chung, mỗi liên kết cộng hoá trị được tạo thành từ một cặp electron. Ví dụ, trong phân tử H_2: hiđro có cộng hoá trị 1 (H – H); trong phân tử N_2: nguyen tử nitơ có cộng hoá trị 3($N \equiv N$) (mỗi gạch nối chỉ một liên kết thực hiện bằng một cặp electron). Cộng hoá trị của cacbon là 4 trong phân tử CH_4, CO_2 v.v...

Trong một số ít trường hợp, liên kết cộng hoá trị được thực hiện bằng một electron, chẳng hạn, trong ion phân tử H_2^+ ($[H - H]^+$); hoặc bằng ba electron như trong phân tử $N \doteq O$, ở đó cả nitơ và oxi đều có cộng hoá trị 3.

Như vậy, rõ ràng là phải biết rõ cấu tạo phân tử của một chất mới xác định được hoá trị của các nguyên tố tạo nên chất đó. Thực tế không phải bao giờ ta cũng làm được điều đó. Vì vậy, các nhà hoá học đưa vào khái niệm hoá trị hình thức: đó là *số oxi hoá* (hay còn gọi là mức oxi hoá, bậc oxi hoá).

Số oxi hoá là điện tích của nguyên tử trong phân tử với giả định rằng tất cả các liên kết trong phân tử đều là liên kết ion. Nguyên tử nào có độ âm điện lớn hơn thì nhận electron, nguyên tử kia thì nhường electron.

Số oxi hoá của các nguyên tố được xác định dựa theo quy ước sau:

(1) Số oxi hoá của nguyên tố trong đơn chất bằng không.

(2) Đối với các ion đơn nguyên tử, số oxi hoá bằng điện tích của ion đó. Ví du: số oxi hoá của các ion K^+, Mg^{2+}, Br^-, S^{2-} ... lần lượt bằng +1, +2, −1, −2.

(3) Trong các hợp chất

• Số oxi hoá của hiđro bằng +1 trừ hợp chất của hidro với các kim loại hoạt động nhóm IA, IIA, IIIA, trong đó số oxi hoá của hiđro là −1. Ví dụ: $Ca^{2+}H_2^-$ v.v...

• Số oxi hoá của oxi trong đại đa số trường hợp bằng -2, trừ hợp chất với flo $(\overset{-1}{F_2}\overset{+1}{O_2})$, $(\overset{-1}{F_2}\overset{+2}{O})$ trong đó số oxi hoá của oxi là +1, +2.

(4) Trong một phân tử trung hoà điện, tổng đại số các số oxi hoá của các nguyên tử bằng không.

(5) Trong một ion phức tạp (gồm nhiều nguyên tử), tổng đại số các số oxi hoá của các nguyên tử bằng điện tích của ion đó.

Chú ý: Để tránh nhầm lẫn với điện tích của ion, số oxi hoá được viết dấu trước, số sau; còn điện tích của các ion thì viết số trước, dấu sau. Ví dụ các ion Na^+, Ca^{2+}, Al^{3+}, Cl^-, O^{2-} có số oxi hoá là +1, +2, +3, −1, −2, ...

Cần chú ý rằng, khác với hoá trị, số oxi hoá chỉ là một khái niệm có *tính chất hình thức* và thường không đặc trưng cho trạng thái thực của một nguyên tố trong hợp chất. Vì được xác định một cách quy ước như trên nên trong nhiều trường hợp, số oxi hoá - không trùng với hoá trị của nguyên tố đó.

Ví dụ trong các hợp chất CH_4, CH_3OH, HCHO, HCOOH và CO_2, cacbon có số oxi hoá lần lượt là −4, −2, 0, +2, +4; trong khi đó cộng hoá trị của cacbon trong tất cả các hợp chất trên đều bằng 4.

Trong ion $[Fe(CN)_6]^{3-}$, sắt có số oxi hoá là +3, còn cộng hoá trị của nó là 6.

Tuy nhiên, khái niệm về số oxi hoá rất có lợi trong việc phân loại các chất. Ví dụ các hợp chất $H\overset{+5}{P}O_3$, $H_3\overset{+5}{P}O_4$, $H_4\overset{+5}{P_2}O_7$... tương tự nhau với số oxi hoá của photpho bằng +5, khác với hợp chất H_3PO_3, trong đó P có số oxi hoá là +3.

Khái niệm số oxi hoá có vai trò đặc biệt quan trọng trong việc nhận ra các phản ứng oxi hoá - khử và cân bằng các phương trình phản ứng oxi hoá - khử như ta đã biết.

Electron hoá trị và số oxi hoá

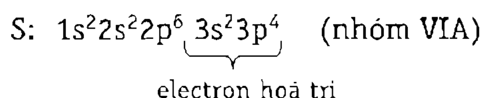
Giữa số oxi hoá của một nguyên tố và cấu hình electron nguyên tử của nó có mối liên hệ giản đơn. Vì theo quy ước trên, mọi phân tử đều được tạo nên bởi các ion, nên số oxi hoá của các nguyên tố ứng với khuynh hướng mất đi hay thu thêm electron để có cấu hình ns^2np^6, $ns^2np^6nd^{10}$.

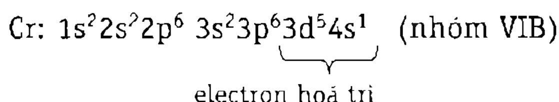
Như vậy, số oxi hoá dương lớn nhất của một nguyên tố bằng số electron hoá trị của nó. Đó là những electron thuộc lớp bên ngoài lớp $1s^2$ của heli, bên ngoài lớp ns^2np^6 của các khí hiếm khác và bên ngoài lớp $ns^2np^6nd^{10}$.

Về nguyên tắc, số electron hoá trị của một nguyên tố bằng số nhóm của nguyên tố đó trong hệ thống tuần hoàn. Đối với các nguyên tố nhóm A, electron hoá trị

thuộc lớp ngoài cùng; đối với các nguyên tố nhóm B, electron hoá trị thuộc lớp ngoài cùng và áp sát lớp ngoài cùng.

Ví dụ : Lưu huỳnh và crom đều ở nhóm VI nên đều có 6 electron hoá trị:





Số oxi hoá dương lớn nhất của lưu huỳnh và crom đều bằng +6.

Số oxi hoá âm của một nguyên tố bằng (8 – N) trong đó N là số nhóm. Ví dụ, số oxi hoá âm của lưu huỳnh là (8 – 6) = 2 (S^{-2}).

6.2. Sự biến đổi số oxi hoá của các nguyên tố

6.2.1. Số oxi hoá của các nguyên tố nhóm A

Nhận xét chung

– Dựa vào cấu hình electron của các nguyên tố loại này, có thể đoán được dễ dàng số oxi hoá thông thường của chúng. Khi tạo thành phân tử hay ion, các nguyên tố bao giờ cũng có khuynh hướng *tiến tới cấu hình bền vững của khí hiếm*: $1s^2$ (đối với heli), lớp vỏ 8 electron ns^2np^6, lớp vỏ 18 electron $ns^2np^6nd^{10}$.

– Vì nguyên tử có thể mất đi từng cặp electron đã ghép đôi hay dùng chung từng cặp một, cho nên nhìn chung, nếu các nguyên tố nhóm A thể hiện nhiều trạng thái oxi hoá, các trạng thái đó *khác nhau từng hai đơn vị*. Tuy nhiên, cũng có những ngoại lệ như Cl^{+4}...

Sau đây ta xét cụ thể sự biến đổi số oxi hoá của các nguyên tố nhóm A.

a) *Nhóm IA* Số oxi hoá +1

Do cấu hình electron ở lớp ngoài cùng chỉ có 1 electron (ns^1) và có độ âm điện rất nhỏ nên số oxi hoá của các nguyên tố nhóm IA trong các hợp chất của chúng chỉ bằng +1.

Ion của các nguyên tố đó có cấu hình electron lớp ngoài cùng s^2 và s^2p^6 rất dễ được tạo thành do năng lượng ion hoá của các nguyên tố rất thấp.

Năng lượng ion hoá thứ hai (I_2) có giá trị lớn hơn I_2 của các nguyên tố nhóm khác rất nhiều, cho ta biết vì sao các nguyên tố nhóm IA không thể hiện số oxi hoá cao hơn.

b) *Nhóm IIA* Số oxi hoá +2, (+1)[1]

Cấu hình electron lớp ngoài cùng là ns^2 nên các nguyên tố nhóm IIA thường có số oxi hoá +2.

(1) Số oxi hoá trong ngoặc không bền.

Nếu chỉ căn cứ vào năng lượng ion hoá, ta có thể nghĩ rằng đối với các nguyên tố trong nhóm có cả khả năng thể hiện số oxi hoá +1.

Mặc dù trạng thái oxi hoá đó cũng thể hiện trong những điều kiện rất nghiêm ngặt đối với Be và Mg, nhưng không đặc trưng cho các nguyên tố khác trong nhóm. Nguyên nhân là như sau:

Mặc dù I_2 lớn hơn I_1 khoảng 2 lần, nghĩa là $I = I_1 + I_2 = 3I_1$ nhưng các dữ kiện năng lượng khác như năng lượng hiđrat hoá, năng lượng mạng lưới tinh thể tăng lên nhiều khi chuyển từ ion 1+ sang ion 2+.

Năng lượng chênh lệch đó vượt quá năng lượng cần thiết để bù cho sự tăng năng lượng ion hoá.

Bảng 3.19. Một số dữ kiện năng lượng (eV/nguyên tử) đối với các nguyên tố nhóm IA, IIA, IB, IIB và các hợp chất của chúng

(ΔH_h: hiđrat hoá, ΔH_{th}: thăng hoa)

Nguyên tố	I_1	I_2	$I_1 + I_2$	$-\Delta H_h$	ΔH*	$-\Delta H_{th}$
Li	5,39	75,6	81,0	5,34	8,63	1,61
Na	5,14	47,3	52,4	4,21	7,94	1,13
K	4,34	31,8	36,1	3,34	7,17	0,93
Rb	4,18	27,4	31,6	3,04	6,95	0,89
Cs	3,89	23,4	27,3	2,74	6,51	0,82
Be	9,32	18,2	27,5	24,8	–	3,33
Mg	7,64	15,0	22,6	20,2	40,8	1,56
Ca	6,11	11,9	18,0	16,6	36,6	2,00
Sr	5,69	11,0	16,7	15,2	34,4	1,70
Ba	5,21	10,0	15,2	13,7	32,5	1,82
Cu	7,72	20,29	28,0	6,04; 22,0(Cu^{2+})		3,54
Ag	7,57	21,48	29,0	5,04		3,00
Au	9,22	20,5	29,7	6,69		3,57
Zn	9,39	17,96	27,3	21,4		1,35**
Cd	8,99	16,90	25,9	19,0		1,17**
Hg	10,43	18,75	29,2	19,1		0,63**

* năng lượng mạng lưới đối với clorua của các nguyên tố nhóm IA và oxit của nhóm IIA.

** nhiệt bay hơi.

c) *Nhóm IIIA* Số oxi hoá +3, (+1)

Nguyên tử của các nguyên tố nhóm IIIA có cấu hình electron ns^2np^1, do đó đối với các nguyên tố này có thể có hai trạng thái oxi hoá là +1 và +3 do sự tham gia của 1 electron p và 2 electron s vào việc tạo thành liên kết hoá học.

Mặc dù đã có những thông báo về các hợp chất của Al, Ga, In trong đó chúng thể hiện số oxi hoá +1 nhưng đối với các nguyên tố nhóm IIIA, số oxi hoá +3 là đặc trưng; trong khi đó ở nguyên tố nặng nhất nhóm là tali (Tl), các hợp chất bền nhất lại thể hiện số oxi hoá +1. Chẳng hạn trong dung dịch nước, thế khử chuẩn của cặp Tl^{3+}/Tl^{+} tương đối lớn :



$$Tl^{3+} + 2e \rightleftharpoons Tl^{+} \qquad E^0 = +\ 1,25\ V$$

Sự *giảm độ bền của các hợp chất có số oxi hoá theo chiều từ trên xuống dưới* chẳng những thể hiện ở Tl (nhóm IIIA) mà còn thể hiện ở những nguyên tố cuối nhóm IVA và VA như Pb, Bi. Đó là do:

– Ở các nguyên tố cuối nhóm, độ bền của cặp trơ ns^2 tăng lên.

– Có sự giảm năng lượng liên kết cộng hoá trị do các nguyên tố ở cuối nhóm có bán kính lớn, sự xen phủ các obitan nguyên tử yếu đi vì các electron hoá trị "loang ra" trong một thể tích lớn; lại thêm có sự gia tăng lực đẩy của các electron không liên kết bên trong.

d) *Nhóm IVA* Số oxi hoá +4, (+2), −4

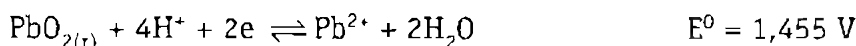
Nguyên tử của các nguyên tố nhóm IVA có cấu hình electron lớp ngoài cùng ns^2np^2, vì vậy chúng có khả năng thể hiện số oxi hoá +2, +4; hơn nữa các nguyên tố đầu nhóm thể hiện ưu tiên số oxi hoá +4. Trên thực tế, cả cacbon và silic không có hợp chất bền ứng với số oxi hoá +2.

Chẳng hạn, mặc dù trong phân tử CO (số oxi hoá của C là +2), cacbon có cộng hoá trị 3 (:C ≡ O:) nhưng trong phản ứng với oxi, oxit cacbon CO dễ dàng chuyển sang CO_2 (số oxi hoá của cacbon là +4). Các phân tử SiO, $SiCl_2$, SiS được điều chế ở nhiệt độ cao, đều không bền.

Độ bền của các hợp chất có số oxi hoá +2 tăng dần theo thứ tự Ge < Sn << Pb và độ bền của các hợp chất có số oxi hoá +4 cũng giảm dần theo thứ tự đó. Chẳng hạn:



(a) $Sn^{4+} + 2e \rightleftharpoons Sn^{2+} \qquad E^0 = 0,15\ V$

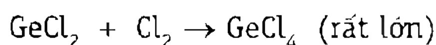


$PbO_{2(r)} + 4H^{+} + 2e \rightleftharpoons Pb^{2+} + 2H_2O \qquad E^0 = 1,455\ V$

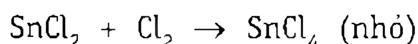
(b) Nhiệt độ phân huỷ các hợp chất với hiđro

Các hợp chất	CH_4	SiH_4	GeH_4	SnH_4	PbH_4
$t_{phân\ huỷ}$ ^0C	800	450	185	150	0

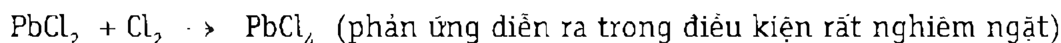
(c) Tốc độ phản ứng kết hợp clo thành điclorua



$GeCl_2 + Cl_2 \rightarrow GeCl_4$ (rất lớn)



$SnCl_2 + Cl_2 \rightarrow SnCl_4$ (nhỏ)



$PbCl_2 + Cl_2 \rightarrow PbCl_4$ (phản ứng diễn ra trong điều kiện rất nghiêm ngặt)

(d) Hợp chất tetrahalogenua được biết đối với tất cả các nguyên tố nhóm IVA trừ $PbBr_4$, PbI_4.

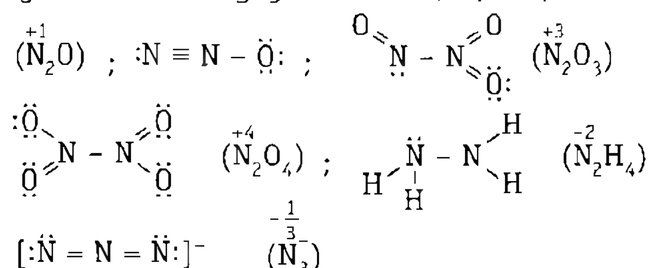
Số oxi hoá âm có thể thể hiện trong các hợp chất của cacbon, silic và một vài hợp chất của gecman khi các nguyên tố đó kết hợp với các nguyên tố có độ âm điện lớn hơn.

e) *Nhóm VA* Số oxi hoá −3, +3, +5.

Từ cấu hình electron lớp ngoài cùng ns^2np^3 của các nguyên tố nhóm VA, có thể dự đoán ba mức oxi hoá chính là −3, +3, +5.

Nitơ thể hiện mọi mức oxi hoá từ −3 đến +5 cũng như các số thập phân $-\frac{1}{3}$ trong ion azit N_3^-.

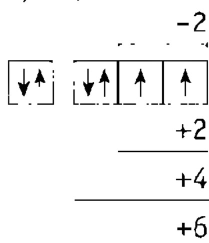
Sở dĩ như vậy là do nguyên tử nitơ có khả năng tạo thành những mạch nguyên tử(*) tương tự cacbon, silic và tạo thành liên kết π giữa các nguyên tử trong mạch cũng như với các nguyên tố khác, đặc biệt là với oxi. Ví dụ:



Số oxi hoá −3 đặc trưng cho các nguyên tố nhẹ nhất trong nhóm. Độ bền của các hợp chất có số oxi hoá −3 và +5 giảm theo chiều từ trên xuống dưới, còn số oxi hoá +3 thì lại biến đổi theo chiều ngược lại, đặc biệt là với Sb và Bi.

f) *Nhóm VIA* số oxi hoá −2, +2, +4, +6

Với cấu hình electron lớp ngoài cùng ns^2np^4, các nguyên tố nhóm VIA có khả năng thể hiện các mức oxi hoá −2, +2, +4, +6.



(*) Mạch dài nhất không qua 8 nguyên tử.

Vì để tạo thành cấu hình bền của khí hiếm chỉ còn thiếu có hai electron nên các nguyên tố nhóm VIA thể hiện số oxi hoá -2 rất dễ dàng, đặc biệt là các nguyên tố nhẹ nhất trong nhóm.

Oxi tạo thành oxit nhị tố (gồm hai nguyên tố) với tất cả các nguyên tố (trừ khí hiếm).

Trong các oxit, các nguyên tố có thể thể hiện các số oxi hoá khác nhau nhưng trong hầu hết các oxit, oxi chỉ thể hiện số oxi hoá –2, trừ một số trường hợp trong đó số oxi hoá của oxi bằng –1 trong peoxit (như H_2O_2); bằng $-\frac{1}{2}$ trong các peoxit thấp (như KO_2); bằng $-\frac{1}{3}$ trong các ozonit (như KO_3) hay có số oxi hoá bằng +1 trong O_2F_2 và +2 trong OF_2.

Đối với các nguyên tố khác trong nhóm, *theo chiều từ trên xuống dưới, số oxi hoá âm –2 ngày càng kém bền và số oxi hoá dương +4 ngày càng bền*. Vì vậy H_2Te và H_2Po không bền và dễ bị phân huỷ thành các nguyên tố thành phần.

Hợp chất với số oxi hoá +6 đều là những chất oxi hoá mạnh (trừ MF_6).

g) ***Nhóm VIIA*** (nhóm halogen) có số oxi hoá –1, +1, +3, +5, +7, trong đó quan trọng hơn cả là các số oxi hoá –1, +5, +7.

Nhóm halogen có cấu hình electron lớp ngoài cùng là ns^2np^5 nên có khả năng thể hiện các số oxi hoá vừa nêu trên.

Vì ở nguyên tử flo chỉ còn thiếu một electron để bão hoà lớp ngoài cùng, hơn nữa kích thước lại nhỏ, cho nên trong các hợp chất, flo chỉ thể hiện khuynh hướng thu electron, do đó chỉ có số oxi hoá –1.

Đối với tất cả các nguyên tố trong nhóm, khuynh hướng thể hiện *số oxi hoá –1 là đặc trưng*.

Số oxi hoá dương thể hiện trong các hợp chất của các nguyên tố trong nhóm với các halogen có số hiệu nguyên tử nhỏ hơn (trong XX', XX'_3, XX'_5 và IF_7) hay với oxi (trong các oxit, oxiaxit, muối tương ứng).

Độ bền của các hợp chất trong đó halogen có số oxi hoá dương giảm dần theo thứ tự +5 > +7 > +1 > +3 (trong đó có một số ngoại lệ).

Đối với brom, trong một thời gian dài người ta vẫn chưa phát hiện ra số oxi hoá +7 và vẫn coi là một trường hợp bất thường. Cho đến năm 1968, người ta đã thành công trong việc điều chế được hợp chất của brom ứng với số oxi hoá +7 bằng cách oxi hoá kali bromat bằng ozon hay xenon điflorua tạo thành pebromat ($KBrO_4$).

Đối với các halogen, người ta cũng biết số oxi chẵn, chẳng hạn trong hợp chất ClO_2, Cl_2O_6, trong đó clo có số oxi hoá +4, +6. Tuy vậy, những trường hợp này tương đối hiếm.

h) *Nhóm VIIIA* (nhóm khí hiếm) số oxi hoá +2, +4, +6, +8.

Các nguyên tố nhóm VIIIA (các khí trơ) có cấu hình electron lớp ngoài cùng đầy đủ ns^2np^6, có bán kính nguyên tử nhỏ nhất và năng lượng ion hoá lớn nhất trong chu kì, vì vậy chúng rất "trơ" về mặt hoạt động hoá học.

Mặc dù, các khí trơ được tìm ra từ cuối thế kỉ XIX (khí trơ đầu tiên là heli được tìm ra năm 1868), trong gần 100 năm người ta chưa phát hiện được trường hợp nào có sự tạo thành liên kết hoá học với các nguyên tử khí trơ.

Tuy có những hiđrat rắn của các khí trơ nặng và những hợp chất tinh thể kiểu "lồng" của agon trong hiđroquinon, nhưng đó chỉ là sự "lồng vào nhau" một cách cơ học các nguyên tử khí trơ vào lỗ trống của mạng lưới tinh thể hiđroquinon (hoặc nước đá).

Vì những lí do trên, các khí này được mô tả như là "khí trơ" và tính trơ của chúng được coi như là xuất phát điểm khi xây dựng lí thuyết về hoá trị (và được xếp vào nhóm không trong hệ thống tuần hoàn).

Cho đến năm 1962, nhà hoá học trẻ tuổi người Canađa là Bartlett khi đang nghiên cứu hợp chất platin florua là một chất oxi hoá mạnh, tình cờ phơi PtF_6, (có màu đỏ thẫm) ra không khí thì thấy màu nhạt đi. Ông đem phân tích thì thấy chất PtF_6 đã oxi hoá O_2 của không khí tạo thành hợp chất ion $[O_2]^+[PtF_6]^-$.

Từ kết quả trên, ông cho rằng PtF_6 có thể oxi hoá phân tử O_2 thành ion O_2^+ thì nó cũng có khả năng oxi hoá Xe thành Xe^+ vì năng lượng ion hoá thứ nhất của phân tử oxi [$O_2 \rightarrow O_2^+ + 1e$] $I_1 = 12,2$ eV) thực tế bằng năng lượng ion hoá thứ nhất của xenon ($Xe \rightarrow Xe^+ + 1e$, $I_1 = 12,13$ eV); hơn nữa kích thước phân tử của chúng cũng gần bằng nhau (bán kính phân tử O_2 và bán kính nguyên tử của Xe đều vào khoảng 4 Å).

Bartlett trộn hỗn hợp khí xenon (Xe) và PtF_6 ở nhiệt độ phòng và thu được một chất rắn tinh thể màu da cam có thành phần PtF_6Xe với liên kết ion $Xe^+[PtF_6]^-$. Chất này thăng hoa trong chân không; trong nước nó bị thuỷ phân cho Xe, O_2, HF và PtO_2.

Chẳng bao lâu sau đó, các nhà khoa học khác đã điều chế được các tinh thể màu trắng của XeF_2 bằng cách cho tác dụng trực tiếp F_2 với Xe ở 400^0C. Chất này hoàn toàn bền ở nhiệt độ phòng và nóng chảy ở nhiệt độ hơi cao hơn 100^0C.

Các thành tựu trên đã làm tăng nhịp độ nghiên cứu hoá học các khí trơ và cho đến nay đã điều chế được nhiều hợp chất khí trơ. Sau đây là một số ví dụ.

Bảng 3.20. Thành phần một số hợp chất của Kr, Xe và Rn

Loại hợp chất	Các hợp chất đã biết		
	Kr	Xe	Rn
Florua	KrF_2, KrF_4	XeF_2, XeF_4, XeF_6, XeF_8, $XeCl_4$	RnF_4
Oxiflorua	$KrOF_2$	$XeOF_2$, XeO_2F_2, $XeOF_4$	
Oxit		XeO_3, XeO_4	
Axit	H_2KrO_4	H_2XeO_4, H_4XeO_5, H_6XeO_6, H_4XeO_4	
Muối	$BaKrO_4$	K_2XeO_4, Ba_2XeO_5, Na_6XeO_6, Na_4XeO_4	
Phức chất	$Kr^+[SbF_4]^-$	$[XeF]_2^+[TiF_6]^{2-}$; $Xe_2^+[SiF_6]^{2-}$; $Xe[PtF_6]$	

Một số hợp chất khí trơ có ứng dụng thực tế đáng chú ý: người ta dùng làm chất oxi hoá mạnh, làm tác nhân flo hoá và một vài chất có thể dùng làm chất nổ như XeO_3.

Trong số các hợp chất của các khí trơ thì các florua được nghiên cứu kĩ hơn. Ngày nay người ta đã điều chế được nhiều florua bằng phương pháp tổng hợp trực tiếp từ flo và các khí trơ tương ứng. Khi cho các florua tác dụng với nước, có thể thu được các oxi florua, oxit và axit. Khi trung hoà các oxit và axit thì thu được muối tương ứng.

Điều đáng chú ý là *các hợp chất của khí trơ đều gồm các nguyên tố có độ âm điện lớn như flo, oxi và những khí trơ nặng.*

Như ta đã biết, những hợp chất trong đó các nguyên tố thể hiện số oxi hoá cao đều có liên kết cộng hoá trị. Đối với các nguyên tố khí trơ, ở trạng thái cơ bản trong nguyên tử không có electron độc thân nên tương tác hoá học chỉ xảy ra ở những nguyên tử có các obitan hoá trị tự do và năng lượng kích thích không quá lớn. Vì vậy, các nguyên tố nặng (Rn, Kr, Xe) tạo được hợp chất tương đối dễ.

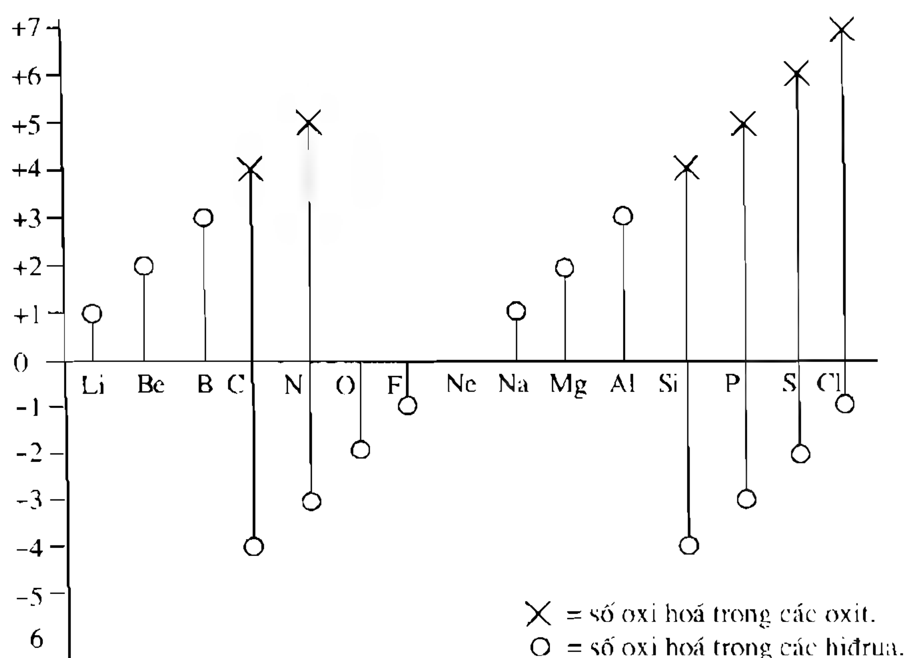
Còn đối với He, Ne, vì các electron ngoài cùng liên kết chặt chẽ với hạt nhân nguyên tử nên khó tạo hợp chất so với Xe, Kr... Vì vậy cho đến nay, các hợp chất của He, Ne còn rất ít và kém bền. Tuy vậy, tính chất của nó cũng được nghiên cứu kĩ như đối với các khí khác, như độ bền liên kết, độ bền của HeH^+ rất gần với tính chất của phân tử H_2 có cùng số electron với nó. (H : H; $[He : H]^+$).

Ngày nay, người ta đã biết số oxi hoá của các khí trơ là +2, +4, +6 và số oxi hoá lớn nhất ứng với số electron ngoài cùng là +8.

Những phát hiện trên đã cải chính tên "trơ" của các khí trơ. Ngày nay, người ta thường gọi chúng là "khí quý" hay "khí hiếm" mặc dầu những tên này cũng chưa phải là đã thoả đáng.

Hình vẽ 3.19 tóm tắt sự biến đổi số oxi hoá dương và âm của các nguyên tố nhóm A theo số hiệu nguyên tử.

Qua hình vẽ ta thấy có sự biến đổi tuần hoàn rõ rệt.



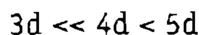
Hình 3.19. Sự biến đổi số oxi hoá của các nguyên tố nhóm A

6.2.2. Số oxi hoá của các nguyên tố nhóm B (các nguyên tố chuyển tiếp)

Các nguyên tố chuyển tiếp có nhiều trạng thái oxi hoá, thấp nhất thường là +2 và cao nhất ứng với số thứ tự của nhóm.

Đó là do các nguyên tố chuyển tiếp có cấu hình electron: $(n-1)d^xns^2$ (đôi khi là $(n-1)d^{x+1}ns^1$) trong đó (x + 2) bằng số thứ tự của nhóm. Ở trạng thái oxi hoá thấp, các nguyên tố chuyển tiếp sử dụng 2 electron của phân lớp ns để tạo liên kết hoá học, còn ở trạng thái oxi hoá cao thì sử dụng cả (x + 2) electron hoá trị.

Khác với các nguyên tố nhóm A, *ở các nguyên tố chuyển tiếp, theo chiều từ trên xuống dưới trong một nhóm B, các hợp chất ứng với số oxi hoá cao ngày càng bền.*



Chẳng hạn, trong nhóm VIIB gồm Mn, Tc, Re thì Mn_2O_7 bị phân huỷ ở 0^0; Tc_2O_7 nóng chảy ở $119^0,5$ mà chưa bị phân huỷ, còn Re_2O_7 nóng chảy ở 220^0 và bay hơi mà không bị phân huỷ.

Sở dĩ như vậy là do các nguyên tố cuối nhóm có khả năng tạo thành liên kết cộng hoá trị rất bền do các obitan (n – 1)d tạo thành liên kết π (ở đây các obitan (n – 1)d nhận các cặp electron chưa liên kết của các ligan F^- và O^{2-}). Khả năng này tăng theo chiều từ trên xuống dưới.

Như vậy, sự dịch chuyển các electron σ và electron π từ ligan đến nguyên tử kim loại trung tâm tăng khi điện tích hiệu dụng của các nguyên tử ở cuối nhóm tăng lên.

Hơn nữa, khi chuyển từ các nguyên tố 3d đến 4d, kích thước nguyên tử tăng ít và khi chuyển từ 4d đến 5d, thực tế không thay đổi, vì vậy ở cuối nhóm tỉ số $Z_{hiệu\ dụng}/r^{2}_{cộng\ hoá\ trị}$ tăng lên, mà điều này có ý nghĩa quan trọng hơn sự tăng $Z_{hiệu\ dụng}$ đơn thuần.

Bảng 3.21 dưới đây ghi số oxi hoá của các nguyên tố chuyển tiếp, trong đó các trạng thái oxi hoá bền được khoanh tròn.

Bảng 3.21. Số oxi hoá của một số nguyên tố chuyển tiếp

Kim loại	Scandi	Titan	Vanadi	Crom	Mangan	Sắt	Coban	Niken	Đồng	Kẽm
Cấu hình e	d^1s^2	d^2s^2	d^3s^2	d^5s^1	d^5s^2	d^6s^2	d^7s^2	d^8s^2	$d^{10}s^1$	$d^{10}s^2$
Trạng thái oxi hoá	③	1 2 ③ ④	1 2 ③ 4 ⑤	1 ② ③ 4 5 ⑥	1 ② 3 ④ 5 ⑥ ⑦	1 ② ③ 4 5 6	1 ② ③ 4 5	1 ② 3 4	① ② 3	②
Ví dụ:										
+I									CuCl	
+II				$CrCl_2$	$MnCl_2$	$FeCl_2$	$CoCl_2$	$NiCl_2$	$CuCl_2$	$ZnCl_2$
+III	$SeCl_3$	$TiCl_3$	VCl_3	$CrCl_3$		$FeCl_3$				
+IV		TiO_2			MnO_2					
+V			V_2O_5							
+VI				CrO_4^-	MnO_4^{2-}					
+VII					MnO_4^-					

Nhận xét

Qua bảng trên ta thấy :

(1) *Trạng thái bền* nhất đối với các nguyên tố có cấu hình electron từ *$(n-1)d^1$ đến $(n-1)d^5$* (trong đó không có electron ghép đôi) *ứng với số oxi hoá cực đại* và tất cả các electron thuộc phân lớp (n – 1)d đều tham gia vào việc hình thành liên kết hoá học.

Đối với các nguyên tố có *số electron d lớn hơn 5* (trong đó có một số electron đã ghép đôi như Fe, Co, Ni) thì *trạng thái bền ứng với số oxi hoá thấp nhất;* hơn nữa số oxi hoá cao nhất không quá +6. Đó là do kết quả của sự tăng năng lượng liên kết của các electron d ở lớp (n – 1) so với các electron ns.

(2) Ở các nguyên tố chuyển tiếp có nhiều trường hợp *thể hiện số oxi hoá - không ứng với số nhóm.*

a) Ở các nguyên tố nhóm IB, số oxi hoá cao nhất lớn hơn số nhóm.

Cu, Ag, Au thể hiện số oxi hoá +1, +2, +3 (trừ Au không có số oxi hoá +2). Các nguyên tố trên đều có cấu hình electron $(n-1)d^{10}ns^1$. Các phân mức năng lượng (n −1)d xấp xỉ các phân mức ns, cụ thể là các phân mức 3d, 4d và 5d xấp xỉ phân mức 4s, 5s và 6s, hơn nữa phân lớp $(n-1)d^{10}$ mới được xây dựng xong cho nên các electron d có thể tham gia vào việc hình thành liên kết hoá học.

Tuy nhiên, năng lượng kích thích từ phân mức (n −1)d lên phân mức ns ở ba nguyên tố trên có khác nhau.

Cụ thể là : $(n-1)d^{10} \rightarrow (n-1)d^9ns^1$ đối với Cu (I) là 262,0 kJ/mol;

Ag (I) là 469,49 kJ/mol; Au (I) là 180,20 kJ/mol.

Ta thấy năng lượng kích thích đó thấp nhất đối với vàng rồi đến đồng và cao nhất là đối với bạc, do đó vàng có thể thể hiện số oxi hoá +3, đồng +2 và bạc +1.

b) Ở nhiều nguyên tố nhóm VIIIB, số oxi hoá cao nhất nhỏ hơn số nhóm

Ta đã biết trong số 9 nguyên tố thuộc 3 nhóm 8, 9, 10 (trong nhóm VIIIB), chỉ có hai nguyên tố là Ru và Os thể hiện số oxi hoá cao nhất là +8 bằng số nhóm (trong các hợp chất RuO_4 và OsO_4).

Các nguyên tố khác thể hiện nhiều trạng thái oxi hoá nhưng không quá +6 (về nguyên nhân xem nhận xét 1).

Thật ra, sự thể hiện số oxi hoá "bất thường" không phải chỉ riêng đối với các nguyên tố chuyển tiếp. Chưa kể các lantanit và actinit, đã có tới 17 trong số 76 nguyên tố (≈ 22%) có số oxi hoá cao nhất không bằng số nhóm.

Các nguyên tố có số oxi hoá cao nhất không bằng số nhóm (hoặc lớn hơn, hoặc nhỏ hơn và thường là nhỏ hơn) được ghi trong bảng sau đây.

Bảng 3.22. Các nguyên tố có số oxi hoá cao nhất không bằng số nhóm

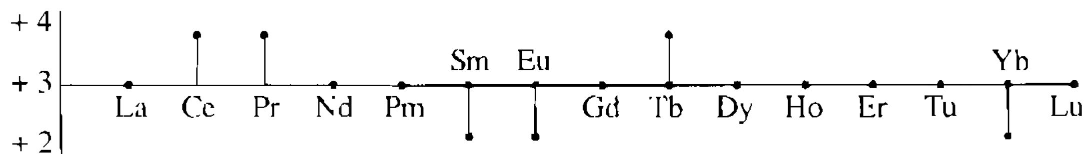
Số nhóm	Nguyên tố	Số oxi hoá cao nhất	Nguyên tố	Số oxi hoá cao nhất	Nguyên tố	Số oxi hoá cao nhất
I	Cu	+3	Ag	+2	Au	+3
VI	O	+2	Po	+4		
VII	F	1			At	+5
VIII	Fe	+6				
	Co	+4	Rh	+6	Ir	+6
	Ni	+4	Pd	+4	Pt	+6
	Kr	+6			Rn	+6

6.2.3. Số oxi hoá của các lantanit và actinit

a) Đối với các nguyên tố họ Lantan

Với các nguyên tố họ Lantan, nói chung số oxi hoá +3 là đặc trưng. Đó là vì ở các nguyên tố họ Lantan, các electron hoá trị ...$6s^25d^1$ tham gia vào việc hình thành liên kết hoá học (nếu phân lớp 5d không có electron thì electron $4f^1$ sẽ tham gia liên kết).

Số oxi hoá của các lantanit được trình bày trong sơ đồ sau:



Hình 3.20. Sự biến đổi số oxi hoá của các lantanit

– Trạng thái +2 thể hiện ở Eu, Yb và Sm (ở Sm trạng thái +2 không bền). Điều này cũng phù hợp với quy luật: cấu hình electron của Eu là $6s^24f^7$ (phân lớp $4f^7$ nửa bão hoà), cấu hình của Yb là $6s^24f^{14}$ (phân lớp $4f^{14}$ bão hoà), chúng có thể mất đi hai electron ở phân lớp 6s. Trạng thái oxi hoá +2 ở Sm chưa rõ nguyên nhân.

Tất cả ba nguyên tố này ở trạng thái +2 đều dễ bị oxi hoá và ngay cả trong nước chúng cũng bị oxi hoá đến trạng thái +3.

– Đối với Ce, trạng thái oxi hoá +4 phổ biến hơn +3.

Đối với Pr và Tb, trạng thái oxi hoá +4 chỉ thể hiện trong các hợp chất rắn.

– Trạng thái oxi hoá +4 của ceri va tecbi là phù hợp với quy luật bởi vì Ce^{+4} có cấu hình electron của vỏ khí hiếm $4s^24p^6$; còn Tb^{+4} có cấu hình $6s^24f^{14}$ (phân lớp $4f^7$ nửa bão hoà).

b) Đối với các nguyên tố họ Actini

Số oxi hoá của các actini nói chung không biến đổi đều đặn như đối với các lantanit.

Các actinit có số oxi hoá +2, +3, +4, +5, +6 và +7 (đã điều chế được các hợp chất của Np và Pu có số oxi hoá +7).

Ba nguyên tố đầu họ Th, Pa, và U có số oxi hoá bền lần lượt là +4, +5, +6. Bắt đầu từ nguyên tố Cm (số 96), số oxi hoá +3 mới là phổ biến.

c) Sự tuần hoàn nội tại

Trong các chu kì lớn, có sự lặp lại một số tính chất của các nguyên tố như tính kim loại, phi kim, trạng thái oxi hoá v.v...

Hiện tượng này được gọi là sự tuần hoàn nội.

Chẳng hạn trong chu kì 5, số oxi hoá biến đổi từ +1 ở rubiđi (nhóm IA) đến +8 ở ruteni (nhóm VIIIB), sau đó giảm xuống +1 ở bạc (nhóm IB) để rồi lại tăng dần đến +8 ở xenon (nhóm VIIIA).

Tính chất kim loại giảm dần từ Rb đến Ru, sau đó tăng lên ở Ag rồi lại giảm dần cho đến I.

Đối với các chu kì lớn khác cũng tương tự.

Đối với các lantanit

Nói chung, tính chất của các nguyên tố họ Lantan rất giống nhau, tuy nhiên có từng cặp nguyên tố có tính chất giống nhau hơn, đó là:

57 La – 64 Gd;

58 Ce – 65 Tb;

59 Pr – 66 Dy;

60 Nd – 67 Ho;

61 Pm – 68 Er

62 Sm – 69 Tm;

63 Eu – 70 Yb;

64 Gd – 71 Lu.

Như vậy, trong họ Lantan từng cặp nguyên tố giống nhau nhất ở cách nhau bảy nguyên tố. Ta có thể viết họ Lantan thành bảy phân nhóm: mỗi phân nhóm gồm hai nguyên tố.

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu
Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Lu						

Về trạng thái oxi hoá, như trên đã thấy, cũng có sự biến đổi tuần hoàn nội tại.

La^{+3} Ce^{+4} .... Eu^{+2}

Gd^{+3} Tb^{+4} .... Yb^{+2}

Lu^{+3}

Có cơ sở để cho rằng trong họ Actini cũng có sự tuần hoàn nội tại tương tự như họ Lantan.

6.3. Hoá trị của các nguyên tố

6.3.1. Điện hoá trị

Như trên đã thấy (phần năng lượng ion hoá, ái lực với electron) do năng lượng ion hoá thứ hai, thứ ba, thứ tư... (E_2, E_3, E_4... E_n) ngày càng tăng nên khả năng tạo thành cation có điện tích lớn ngày càng khó. Thực tế cho thấy, sự tạo thành cation hoá trị 1+, 2+ xảy ra tương đối dễ dàng, hoá trị 3+ đã là khó khăn, hoá trị 4+ rất hiếm.

Cũng tương tự như vậy, sự tạo thành anion có điện tích 1– là dễ dàng đối với phi kim mạnh, nhưng sự tạo thành anion có điện tích 2– đã là quá trình thu nhiệt; các anion có điện tích 3– đặc biệt là 4– rất ít gặp.

Vì vậy, điện hoá trị của các nguyên tố được xác định bằng điện tích của các ion (cả cation và anion) cũng chỉ giới hạn ở những số trên.

6.3.2. Cộng hoá trị

Cộng hoá trị tối đa của một nguyên tố phụ thuộc vào số electron hoá trị và số obitan hoá trị của nguyên tố đó.

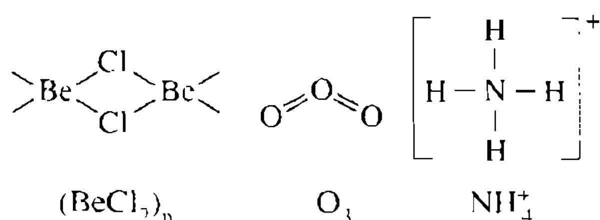
a) *Đối với các nguyên tố thuộc chu kì hai*

Ở lớp ngoài cùng của các nguyên tố thuộc chu kì hai chỉ có 4 obitan gồm một obitan 2s và ba obitan 2p. Giữa các mức 2s2p và 3s3p tiếp theo có hiệu số năng lượng lớn. Sự kích thích electron 2s2p lên các mức 3s3p đòi hỏi phải cung cấp nhiều năng lượng mà sự tạo thành liên kết không bù đắp lại được, do đó các nguyên tố chu kì hai không thể tạo thành quá bốn liên kết cộng hoá trị trong các hợp chất cũng như đơn chất.

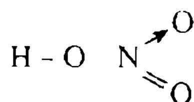
Cụ thể là đối với các nguyên tố sau có cộng hoá trị thông thường là:

Li	Be	B	C	N	O	F
1	2	3	4	3	2	1

Cộng hoá trị tối đa của chúng không quá 4. Ví dụ:



Còn trường hợp của nitơ thì trong các hợp chất ứng với số oxi hoá +5 (chẳng hạn như HNO_3), nitơ cũng chỉ có cộng hoá trị 4. Dưới đây là một trong những dạng đề nghị công thức cấu tạo HNO_3 :



b) *Đối với các nguyên tố thuộc các chu kì sau*

Ở đây, hiệu số năng lượng giữa các obitan nsnp ở lớp ngoài cùng và các obitan tiếp theo nhỏ hơn nhiều so với trường hợp của chu kì hai, vì vậy những obitan tiếp theo này cũng có thể được sử dụng để tạo thành liên kết hoá học. Chẳng hạn, phân mức 3d xấp xỉ 4s nên có thể sử dụng hoặc obitan 4s hoặc các obitan 4s và 3d để tạo thành liên kết.

– Những nguyên tố nào khi tạo thành liên kết chỉ sử dụng các obitan s và p cũng đối xử như các nguyên tố ở chu kì 2.

– Những nguyên tố nào khi tạo thành liên kết có sử dụng cả các obitan d thì có thể tạo thành những phân tử mà nguyên tử trung tâm có số electron hoá trị lớn hơn 8 và số liên kết cộng hoá trị lớn hơn 4.

Ví dụ các nguyên tố thuộc chu kì ba có thể tạo thành các phân tử và ion sau đây mà các nguyên tố tương tự của chúng thuộc chu kì hai không thể có được.

SiF_6^{2-}	PCl_5	PF_6^-	SF_6
(12)	(10)	(12)	(12)

Số electron trong ngoặc là số electron bên ngoài phân bố chung cho cả phân tử. Các hợp chất tương ứng của các nguyên tố thuộc chu kì hai là :

CF_4	NCl_3	NF_3	OF_2
(8)	(8)	(8)	(8)

c) Đối với các nguyên tố chuyển tiếp

Vì các phân mức ns, (n –1)d, np gần nhau, các electron thuộc 9 obitan (một obitan s, ba obitan p, năm obitan d) có thể tham gia vào việc hình thành liên kết hoá học, nên *về nguyên tắc, các nguyên tố thuộc chu kì ba có cộng hoá trị 9* (ngay cả khi không dùng tới các obitan f), *nhưng thường có cộng hoá trị không quá 6*. Đó là do những nguyên tố này có kích thước tương đối nhỏ và có sự *án ngữ không gian*, nên không thể tạo thành liên kết với quá 6 nguyên tử.

Sự án ngữ không gian có vai trò rất lớn trong việc tạo thành một hợp chất, cho nên ở nhiều nguyên tử chỉ có thể thực hiện được cộng hoá trị tối đa trong trường hợp các nguyên tử bao quanh phải có kích thước đủ nhỏ.

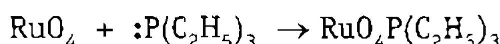
Chính vì vậy mà có ion SiF_6^{2-} lại không có ion $SiCl_6^{2-}$; có phân tử SF_6 lại không có phân tử SCl_6 v.v...

Trong các chu kì tiếp theo, ở đó kích thước các nguyên tử trung tâm đủ lớn thì có thể có cộng hoá trị tới 7, 8.

Ví dụ, có các hợp chất IF_7, $[Mo(CN)_8]^{4-}$, OsO_4, $ReOF_5$ v.v... nhưng những trường hợp có cộng hoá trị lớn hơn sáu nói chung cũng hiếm.

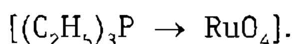
Người ta đã biết có cộng hoá trị 9 như trường hợp của Ru trong hợp chất $RuO_4P(C_2H_5)_3$.

Trong RuO_4, Ruteni đã sử dụng 8 obitan để tạo thành 8 liên kết cộng hoá trị với oxi. Còn lại một obitan tự do nên phản ứng tiếp theo:



$$RuO_4 + :P(C_2H_5)_3 \rightarrow RuO_4P(C_2H_5)_3$$

Ở đây $:P(C_2H_5)_3$ liên kết phối trí với nguyên tử trung tâm Ru để tạo thành hợp chất trên:



$$[(C_2H_5)_3P \rightarrow RuO_4].$$

7. SỰ BIẾN ĐỔI TUẦN HOÀN SỐ HẠNG QUANG PHỔ NGUYÊN TỬ

Sự biến đổi tuần hoàn tính chất các nguyên tố chẳng những do sự biến đổi tuần hoàn cấu hình electron của nguyên tử các nguyên tố như đã xét ở phần trên mà còn do sự biến đổi tuần hoàn độ bội của số hạng nguyên tử.

Độ bội của các số hạng (g) *là một tính chất vật lí thuần tuý, có liên quan mật thiết với một tính chất cơ bản của hoá học, đó là hoá trị (B)* của các nguyên tố, (Kí hiệu số hạng quang phổ $^{g}L_{J}$).

Ta biết rằng, theo Lewis – London (Louyt-Lonđơn) thì hoá trị của một nguyên tố được xác định bởi số electron độc thân trong nguyên tử; đó là những electron có khả năng tham gia vào việc tạo thành liên kết hoá học. Như vậy, theo cách tính số n electron độc thân thì:

$$n = g - 1$$

Cũng có thể coi $B = g - 1$.

Do đó, quang phổ phát xạ có liên quan chặt chẽ tới cấu trúc của hệ thống tuần hoàn, trong đó số thứ tự của nhóm ứng với hoá trị đặc trưng của nguyên tố.

Trong một chu kì, đi từ trái qua phải, *độ bội tăng xen kẽ giữa các số chẵn* (bội đôi, bội bốn, bội sáu...) *và số lẻ* (đơn, bội ba, bội năm, bội bảy...) (xem bảng 3.23).

7.1. Độ bội và hoá trị đặc trưng của các nguyên tố thuộc chu kì bốn

Bảng 3.23. Sự biến đổi độ bội và hoá trị đặc trưng của các nguyên tố đầu chu kì bốn

Nhóm	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB
Độ bội	K Đôi	Ca Đơn Bội ba	Sc Đôi Bội bốn	Ti Bội ba Bội năm	V Bội bốn Bội sáu	Cr Bội ba Bội năm Bội bảy	Mn Bội sáu Bội tám	Fe Bội ba Bội năm Bội bảy
Hoá trị đặc trưng	1	2	3	4	5	6	7	6

7.2. Số hạng quang phổ nguyên tử đối với các nguyên tố họ s và p

(Lấy chu kì 2 làm ví dụ. Xem bảng 3.24.)

Bảng 3.24. Số hạng quang phổ nguyên tử đối với các nguyên tố họ s và p

Nguyên tố	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Lớp electron ngoài cùng	s^1	s^2	s^2p^1	s^2p^2	s^2p^3	s^2p^4	s^2p^5	s^2p^6
Số electron độc thân	1	0	1	2	3	2	1	0
Số hạng quang phổ ^gL_J	$^2S_{1/2}$	$^1S_0$	$^2P_{1/2}$	$^3P_0$	$^4S_{3/2}$	$^3P_2$	$^2P_{3/2}$	$^1S_0$

Đối với trạng thái cơ bản của các nguyên tố thuộc chu kì 2, tuỳ thuộc vào số electron s và p *tương đương*, các số hạng quang phổ nguyên tử được viết như trên.

(Electron tương đương là những electron có số lượng tử n và số lượng tử l như nhau).

Các nguyên tố họ s và p thuộc cùng một nhóm (nhóm A) trong hệ thống tuần hoàn được đặc trưng bằng những số hạng cơ bản như nhau. Chẳng hạn số hạng của tất cả các kim loại kiềm là $^2S_{1/2}$, từ đó hoá trị của chúng đều là 1.

7.3. Số hạng quang phổ nguyên tử với các nguyên tố d

Lấy họ 3d làm ví dụ (bảng 3.25).

Bảng 3.25. Số hạng quang phổ nguyên tử với các nguyên tố d

Nguyên tố	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
Lớp electron ngoài cùng	$3d4s^2$	$3d^24s^2$	$3d^34s^2$	$3d^54s^1$	$3d^54s^2$	$3d^64s^2$	$3d^74s^2$	$3d^84s^2$	$3d^{10}4s^1$	$3d^{10}4s^2$
Số hạng quang phổ ^gL_J	$^2D_{3/2}$	$^3F_2$	$^4F_{3/2}$	$^7S_3$	$^6S_{5/2}$	$^5D_4$	$^4F_{9/2}$	$^3F_4$	$^2S_{1/2}$	$^1S_0$

Đối với họ 4d và 5d cũng tương tự như vậy.

Các nguyên tố họ d thuộc cùng một (nhóm B) trong hệ thống tuần hoàn được đặc trưng bởi số hạng cơ bản như nhau.

Chẳng hạn các nguyên tố Cu, Ag, Au thuộc nhóm IB đều có số hạng quang phổ là $^2D_{3/2}$; các nguyên tố Se, Y, La thuộc nhóm IIIB đều có số hạng quang phổ là $^2D_{3/2}$.

Tuy nhiên, do việc điền electron vào các lớp vỏ electron của các nguyên tố chuyển tiếp (họ d) diễn ra không đều đặn như đối với các nguyên tố họ s và p nên ở một vài nhóm B, các nguyên tố cùng nhóm có cấu hình electron không giống nhau nên có số hạng quang phổ khác nhau. Chẳng hạn nhóm VIB:

Nguyên tố	Cr	Mo	W
Cấu hình electron	d^5s^1	d^5s^1	d^4s^2
Số hạng quang phổ	$^7S_3$	$^7S_3$	$^5D_0$

7.4. Trạng thái cơ bản, trạng thái kích thích

Như đã nhận xét ở trên (phần B), số hạng quang phổ ở trạng thái cơ bản của các nguyên tố nhóm IIA (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra) là $^1S_0$, do đó độ bội g = 1 và hoá trị đặc trưng B =g−1=0. Tuy nhiên, trên thực tế, trong các hợp chất, các nguyên tố đó thể hiện hoá trị 2. Vì sao?

Ta biết rằng ngoài trạng thái cơ bản, khi được cung cấp năng lượng từ ngoài vào, các nguyên tử chuyển sang trạng thái kích thích với điều kiện là còn có các obitan trống ở các phân lớp tiếp theo.

Chẳng hạn, lớp ngoài cùng của nguyên tử Ca (n = 4) có hai electron chiếm phân lớp s (cấu hình $4s^2$), nhưng trong nguyên tử đó còn có phân lớp p với 3 obitan còn trống; một trong số đó có thể nhận electron của phân lớp s chuyển lên.

Ở trạng thái kích thích, cấu hình electron của nguyên tử Ca là $4s^14p^1$: có hai electron độc thân đặc trưng bởi độ bội g = 3 và hoá trị B = g − 1 = 2.

Trên thực tế, trong quang phổ nguyên tử của Ca và các kim loại kiềm thổ khác, người ta quan sát thấy các vạch đơn (g = 1) cũng như các vạch ba (tam nguyên) [g = 3].

Nếu hiệu số năng lượng của các phân mức không lớn thì sự kích thích thực tế có thể xảy ra như trường hợp ta vừa nêu.

Sự tăng số electron độc thân trong nguyên tử làm cho hoá trị của nguyên tố tăng lên. Chẳng hạn Al có thể thể hiện hoá trị 1 và 3; Si: 2 và 4; P: 3 và 5; S: 2, 4, 6 v.v...

Nguyên nhân các nguyên tố thể hiện nhiều trạng thái hoá trị là do độ bội của cac số hạng quang phổ nguyên tử khác nhau.

Vì số hạng quang phổ nguyên tử có độ bội cao (7, 8, 9...) ít khi thể hiện nên các trạng thái hoá trị cao tương đối ít khi xảy ra. (Về sự biến đổi tuần hoàn hoá trị của các nguyên tố đã xét kĩ ở phần trên).

8. SỰ BIẾN ĐỔI MỘT SỐ TÍNH CHẤT VẬT LÍ CỦA CÁC ĐƠN CHẤT

8.1. Nhiệt độ nóng chảy (kí hiệu là t_{nc})

Nhiệt độ nóng chảy của một chất là nhiệt độ ở đó pha rắn nằm cân bằng với pha lỏng ở áp suất nhất định (thường lấy là áp suất khí quyển).

Đi từ trái qua phải trong một chu kì, nhiệt độ nóng chảy của các đơn chất tăng từ các kim loại đến nửa kim loại và giảm đột ngột ở các phi kim.

Sở dĩ như vậy vì nhiệt độ nóng chảy của một chất phụ thuộc vào hai yếu tố:

- Cấu trúc tinh thể của chất rắn.
- Liên kết trong chất rắn.

Khi có sự thay đổi đột ngột cả về cấu trúc lẫn liên kết sẽ gây ra sự biến đổi đột ngột nhiệt độ nóng chảy.

Ví dụ trong chu kì 3:

Nguyên tố:	Na	Mg	Al	Si	P
$t_{nc}(^0C)$	97,8	6 49	660	1410	44

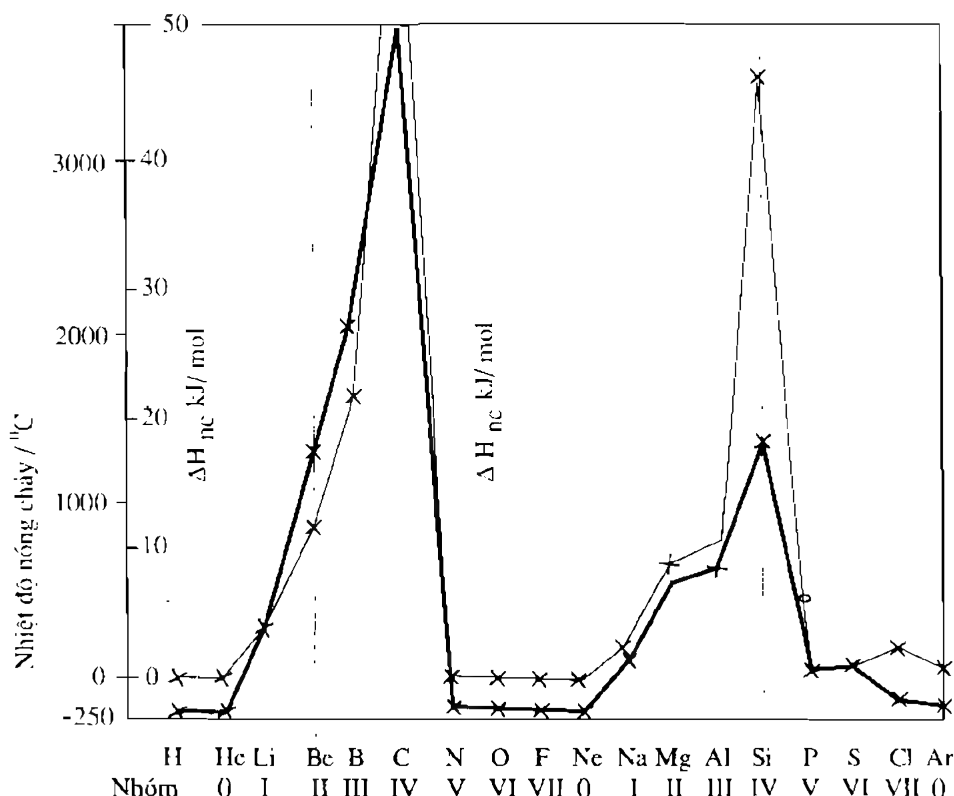
Nhiệt độ nóng chảy của các kim loại Na, Mg, Al tăng từ từ, sau đó có sự tăng đột ngột từ Al đến Si là một nguyên tố nửa kim loại có cấu trúc tinh thể nguyên tử. Sau đó lại có sự giảm đột ngột hơn từ Si đến P là một chất có cấu trúc phân tử P_4 với liên kết cộng hoá trị.

Trong chu kì 2, nhiệt độ nóng chảy tăng từ các nguyên tố kim loại Li, Be đến nguyên tố B có cấu trúc tinh thể nguyên tử và sau đó có sự giảm đột ngột từ tinh thể nguyên tử C đến các chất có cấu trúc phân tử đơn giản là N_2, O_2.

8.2. Nhiệt nóng chảy mol (kí hiệu là ΔH_{nc})

Nhiệt nóng chảy mol của một chất là năng lượng cần cung cấp để làm nóng chảy một mol chất đó ở nhiệt độ nóng chảy của nó.

Có sự tương đồng sát sao giữa sự biến đổi tuần hoàn của nhiệt nóng chảy mol và nhiệt độ nóng chảy của các chất.



Hình 3.21. Sự biến đổi nhiệt độ nóng chảy (đường đậm) và nhiệt nóng chảy (đường mảnh) của các nguyên tố theo các nhóm

Khi có sự thay đổi lớn về cấu trúc hoặc liên kết thì cũng có sự thay đổi đột ngột ΔH_{nc} theo chiều hướng như đối với t_{nc}.

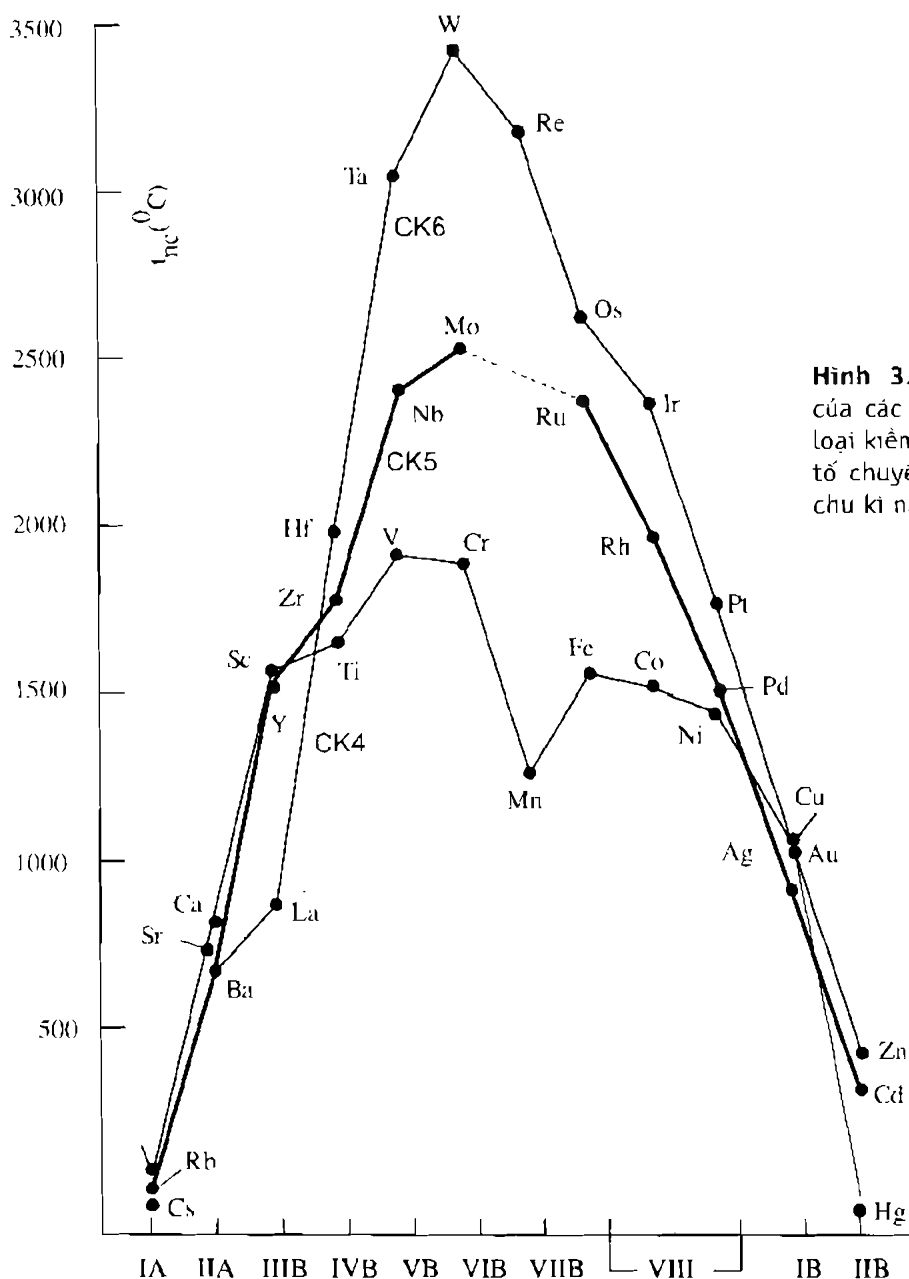
Ta xét sự biến đổi ΔH_{nc} của các chất trong chu kì 3 từ Na đến Ar.

– Khi *các kim loại* Na, Mg, Al nóng chảy, đa số liên kết kim loại vẫn được duy trì, chỉ có một phần hạn chế liên kết bị phá vỡ. Vì vậy, ΔH_{nc} chỉ ở mức vừa phải.

– Đối với *các tinh thể nguyên tử* như silic, hầu như tất cả các liên kết đều bị phá vỡ trước khi chất rắn nóng chảy. Vì vậy ΔH_{nc} rất lớn.

– Đối với *các phân tử đơn giản* (P_4, S_8, Cl_2 và Ar), ΔH_{nc} rất nhỏ bởi vì đối với những chất này, để làm nóng chảy chỉ cần phá vỡ liên kết giữa các phân tử (liên kết Van đe Van) mà liên kết này rất yếu.

Hình 3.22 trình bày sự biến đổi t_{nc} và ΔH_{nc} của các nguyên tố theo chiều tăng của điện tích hạt nhân.



Hình 3.22. Trình bày t_{nc} của các kim loại kiềm, kim loại kiềm thổ và các nguyên tố chuyển tiếp chu kì bốn, chu kì năm, chu kì sau.

8.3. Nhiệt độ sôi (t_s) và nhiệt bay hơi mol (ΔH_{bh})

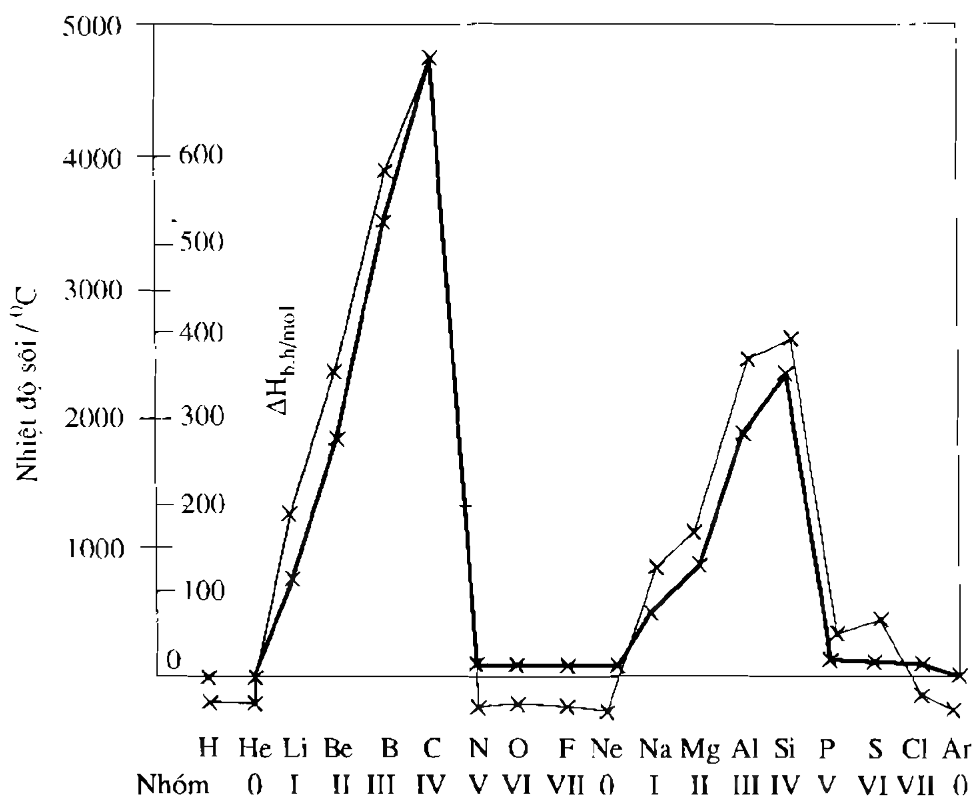
Sự biến đổi tuần hoàn nhiệt độ sôi và nhiệt bay hơi mol của các chất cũng tương tự như sự biến đổi tuần hoàn nhiệt độ nóng chảy và nhiệt nóng chảy mol vừa xét ở trên.

Tuy nhiên, cấu trúc của các chất đã bị phá vỡ khi tạo thành chất lỏng. Do đó t_s và ΔH_{bh} phụ thuộc rất nhiều vào lực liên kết cần phá vỡ để chuyển chất lỏng thành hơi.

– Đối với các kim loại, hầu hết các liên kết vẫn còn tồn tại trong kim loại lỏng. Muốn cho các nguyên tử tách ra xa nhau để tạo thành hơi, cần phá vỡ tất cả các liên kết kim loại. Do đó nhiệt độ sôi của các kim loại cao hơn nhiệt độ nóng chảy rất nhiều ($t_s >> t_{nc}$).

– Đối với các tinh thể nguyên tử như C, Si... hầu hết các liên kết đã bị phá vỡ trong quá trình nóng chảy. Vì vậy, nhiệt độ sôi tuy rất cao nhưng không quá cao so với nhiệt độ nóng chảy. ($t_s > t_{nc}$).

– Đối với các chất có cấu trúc phân tử đơn giản (như P_4, S_8, Cl_2...) để bay hơi chỉ cần phá vỡ lực Van de Van liên kết giữa các phân tử mà lực này thì rất yếu. Vì vậy, đối với hầu hết các chất này, nhiệt độ sôi đều thấp, không cao hơn nhiệt độ nóng chảy bao nhiêu.



Hình 3.23. Sự biến đổi nhiệt độ sôi (đường đậm) và nhiệt bay hơi (đường mảnh) của các nguyên tố theo các nhóm

8.4. Khối lượng riêng

Khối lượng riêng của một chất là khối lượng của chất đó trên một đơn vị thể tích.

Đơn vị khối lượng riêng thường lấy là g/cm^3.

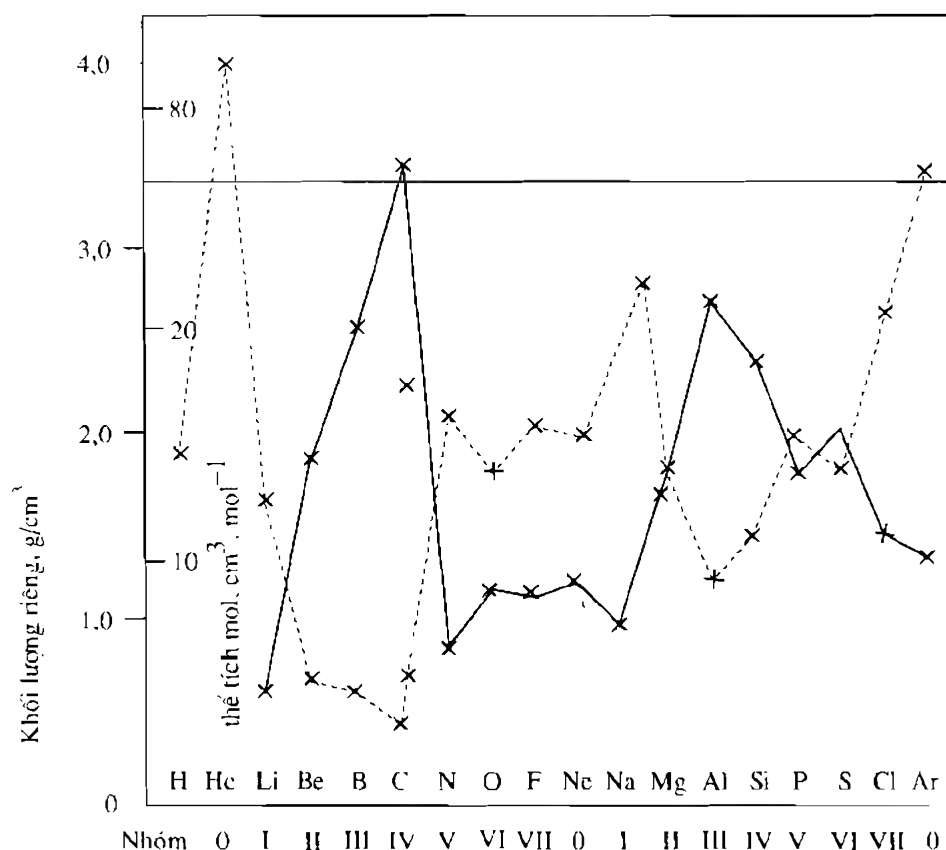
Có nhiều yếu tố ảnh hưởng đến khối lượng riêng của các đơn chất.

(a) Khối lượng nguyên tử.

(b) Bán kính nguyên tử (để xác định thể tích nguyên tử).

(c) Cấu trúc tinh thể (kiểu mạng lưới tinh thể để biết các nguyên tử được sắp xếp gần nhau đặc khít đến mức nào).

Các yếu tố (b) và (c) thay đổi một cách tuần hoàn, do đó khối lượng riêng của các đơn chất tạo nên từ các nguyên tố cũng biến đổi một cách tuần hoàn.



Hình 3.24. Sự biến đổi khối lượng riêng (đường đậm) và thể tích mol (đường mảnh) của các nguyên tố theo nhóm

Từ trái qua phải, khối lượng riêng của các nguyên tố tăng dần và đạt tới cực đại ở nhóm IVA đối với chu kì hai và ba, và ở cuối dãy nguyên tố chuyển tiếp đối với các chu kì sau.

Sở dĩ như vậy là do khối lượng nguyên tử tăng dần và bán kính giảm dần. Khối lượng riêng đạt tới cực đại khi bán kính nguyên tử có giá trị thấp và lực liên kết cộng hoá trị hay lực liên kết kim loại đạt tới cực đại.

Mặc dù có khối lượng nguyên tử lớn và bán kính nhỏ nhưng các nguyên tố phía bên phải của mỗi chu kì đều có khối lượng riêng tương đối thấp. Đó là do chúng được tạo nên từ các cấu trúc phân tử đơn giản và các phân tử liên kết với nhau bằng lực Van de Van yếu.

8.5. Thể tích mol

Thể tích mol của một đơn chất là thể tích chiếm bởi một mol nguyên tử ($6,023 \times 10^{23}$ nguyên tử) của đơn chất đó.

Thể tích mol phụ thuộc vào bán kính nguyên tử của nguyên tố và cấu trúc tinh thể của đơn chất.

Nếu gọi khối lượng nguyên tử là A và khối lượng riêng là ρ (g/cm^3), ta có:

6×10^{23} nguyên tử của nguyên tố có khối lượng là A(g).

6×10^{23} nguyên tử của nguyên tố có thể tích là $\frac{A}{\rho}$ cm^3.

$$\text{Thể tích mol} = \frac{A}{\rho} = \frac{\text{Khối lượng mol nguyên tử}}{\text{Khối lượng riêng}}$$

Vì thể tích mol *tỉ lệ nghịch với khối lương riêng* cho nên có thể dễ dàng thấy rằng sự biến đổi thể tích mol diễn ra *ngược lại* với sự biến đổi khối lượng riêng.

Trong một chu kì, từ trái qua phải, thể tích mol giảm dần đến khi đạt tới một cực tiểu rồi sau đó lại tăng lên.

Tuy nhiên, yếu tố cấu trúc ảnh hưởng đến thể tích mol nhiều hơn là yếu tố bán kính cho nên có sự thay đổi đột ngột thể tích mol khi có sự thay đổi rõ rệt cấu trúc.

Chẳng hạn bán kính nguyên tử của P nhỏ hơn Si nhưng P có thể tích mol lớn hơn. Sở dĩ như vậy là vì tinh thể P là tinh thể phân tử, trong đó các phân tử P_4 liên kết yếu với nhau trong khi đó, tinh thể silic là tinh thể nguyên tử, các nguyên tử Si liên kết với nhau bằng liên kết cộng hoá trị bền vững.

9. SỰ BIẾN ĐỔI CẤU TRÚC, LIÊN KẾT HOÁ HỌC, TÍNH CHẤT LÍ, HOÁ HỌC CỦA CÁC NGUYÊN TỐ

(Lấy chu kì 2 làm ví dụ)

Nhóm	**IA**	**IIA**
Nguyên tố	Li (Z = 3)	Be (Z = 4)
Cấu hình electron	$[He]2s^1$ [He] [↑] [ ][ ][ ] 2s 2p	$[He]2s^2$ [He] [↓↑] [ ][ ][ ] 2s 2p

A. Tính chất vật lí		
1. Phân loại	1. ***Kim loại***	1. ***Kim loại***
2. Cấu trúc	2. Tinh thể kim loại	2. Tinh thể kim loại
3. Độ rắn	3. Mềm	3. Rắn
4. Nhiệt độ nóng chảy (t_{nc})	4. Thấp đối với một kim loại	4. Cao
5. Nhiệt độ sôi (t_{bh})	5. Cao	5. Cao
6. Nhiệt nóng chảy (ΔH_{nc})	6. Vừa phải	6. Cao
7. Nhiệt bay hơi (ΔH_{bh})	7. Vừa phải	7. Cao
8. Thể tích mol	8. Vừa phải	8. Vừa phải
9. Tính dẫn điện	9. Dẫn điện tốt	9. Dẫn điện tốt
B. Tính chất hoá học		
1. Hoạt động hoá học chung	1. Hoạt động mạnh	1. Hoạt động hoá học yếu ở nhiệt độ phòng
2. Liên kết giữa các nguyên tử trong đơn chất	2. Liên kết kim loại	2. Liên kết kim loại
3. Liên kết với các phi kim	3. Liên kết ion	3. Liên kết cộng hoá trị có cực
4. Liên kết với các kim loại	4. Liên kết kim loại	4. Liên kết kim loại
5. Tính chất axit – bazơ của các oxit thường gặp	5. Bazơ mạnh	5. Lưỡng tính
6. Tính chất oxi hoá - khử (số oxi hoá)	6. Chất khử mạnh (+1)	6. Chất khử trung bình (+2)
Nhóm IIIA	**Nhóm IVA**	**Nhóm VA**
B (Z = 5) $[He]2s^2 2p^1$ [He] ↓↑ | ↑ | |	C (Z = 6) $[He]2s^2 2p^2$ [He] ↓↑ | ↑ | ↑ |	N (Z = 7) $[He]2s^2 2p^3$ [He] ↓↑ | ↑ | ↑ | ↑
A. Tính chất vật lí		
1. Bán kim loại	1. Phi kim	1. Phi kim
2. Tinh thể nguyên tử (phân tử khổng lồ)	2. Tinh thể nguyên tử	2. Phân tử đơn giản (N_2)
3. Rất rắn	3. Than chì mềm. Kim cương cực kì rắn.	3. Khí

4. t_{nc} rất cao	4. t_{nc} rất cao	4. Thấp
5. t_s rất cao	5. t_s rất cao	5. Thấp
6. ΔH_{nc} rất cao	6. ΔH_{nc} rất cao	6. Thấp
7. ΔH_{bh} rất cao	7. ΔH_{bh} rất cao	7. Thấp
8. Thấp	8. Thấp	8. Cao
9. Dẫn điện kém	9. Than chì dẫn điện tốt. Kim cương: rất kém	9. Không dẫn điện
B. Tính chất hoá học		
1. Hoạt động hoá học kém ở nhiệt độ phòng	1. Hoạt động hoá học kém ở nhiệt độ phòng. Than chì hoạt động hơn	1. Trơ ở nhiệt độ phòng
2. Liên kết cộng hoá trị bền	2. Liên kết cộng hoá trị bền	2. Phân tử cộng hoá trị N_2
3. Liên kết cộng hoá trị có cực	3. Liên kết cộng hoá trị (thường có liên kết π)	3. Liên kết cộng hoá trị (thường có liên kết π)
4. Liên kết cộng hoá trị có cực	4. Liên kết ion/ cộng hoá trị có cực	4. Liên kết ion
5. Axit rất yếu	5. Axit rất yếu	5. Axit mạnh
6. Hidrua phức là chất khử rất mạnh (+3, -3)	6. Chất khử mạnh ở nhiệt độ cao. Có mọi trạng thái oxi hoá (từ +4 đến –4)	6. Oxi axit là chất oxi hoá rất mạnh (từ +5 đến 3)
Nhóm VIA	**Nhóm VIIA**	**Nhóm VIIIA**
O (Z = 8) [He]$2s^2 2p^4$ [↓↑] [↓↑][↑][↑] 2s 2p	F (Z = 9) [He]$2s^2 2p^5$ [↓↑] [↓↑][↓↑][↑] 2s 2p	Ne (Z = 10) [He]$2s^2 2p^6$ [↓↑] [↓↑][↓↑][↓↑] 2s 2p
A. Tính chất vật lí		
1. Phi kim	1. Phi kim	1. Phi kim
2. Phân tử giản đơn O_2	2. Phân tử giản đơn F_2	2. Phân tử đơn nguyên tử: Ne
3. Khí	3. Khí	3. Khí
4. Rất thấp	4. Rất thấp	4. Cực kì thấp
5. Rất thấp	5. Rất thấp	5. Cực kì thấp
6. Thấp	6. Thấp	6. Rất thấp

7. Thấp	7. Thấp	7. Rất thấp
8. Cao	8. Cao	8. Cao
9. Không	9. Không	9. Không
B. Tính chất hoá học		
1. Rất hoạt động	1. Hoạt động mãnh liệt	1. Trơ
2. Liên kết cộng hoá trị	2. Liên kết cộng hoá trị	2. –
3. Cộng hoá trị (thường có liên kết π)	3. Liên kết cộng hoá trị	3. –
4. Liên kết ion	4. Liên kết ion	4. –
5. –	5. –	5. –
6. O_2 và O_3 là chất oxi hoá mạnh (–2)	6. Là chất oxi hoá mạnh nhất (–1)	6. –

Bảng trên trình bày sự biến đổi tính chất nguyên tử của các nguyên tố chu kì 2 từ Li đến Ne cũng như sự biến đổi tính chất vật lí và hoá học quan trọng.

Nói chung, quy luật biến đổi này cũng áp dụng cho các chu kì khác.

Có những điều đáng chú ý sau:

(1) Các electron điền vào 1 obitan s và 3 obitan p (do đó cộng hoá trị tối đa chỉ bằng 4).

(2) Tính chất kim loại giảm dần khi điện tích hạt nhân tăng. Các nguyên tố thay đổi từ kim loại, đến bán kim loại, đến phi kim.

(3) Hoạt động hoá học mạnh nhất ở đầu chu kì và cuối chu kì (trừ khí hiếm).

(4) Liên kết giữa các nguyên tử trong đơn chất thay đổi từ liên kết kim loại; liên kết cộng hoá trị trong mạng nguyên tử; liên kết cộng hoá trị trong các phân tử giản đơn; cho đến không có liên kết giữa các nguyên tử khí hiếm riêng rẽ.

Tính chất vật lí thay đổi đột ngột ở biên giới mạng nguyên tử/phân tử giản đơn. (trong chu kì 2, giữa cacbon và nitơ).

(5) Liên kết giữa mỗi nguyên tố với một phi kim hoạt động thay đổi từ liên kết ion, đến cộng hoá trị có cực rồi đến cộng hoá trị không cực.

Liên kết giữa mỗi nguyên tố với một kim loại hoạt động thay đổi từ liên kết kim loại, đến cộng hoá trị có cực rồi đến ion.

(6) Tính chất axit – bazơ của các oxit thường gặp thay đổi từ bazơ đến lưỡng tính rồi đến axit khi liên kết giữa nguyên tố tạo oxit với oxi càng giảm tính ion và tăng tính chất cộng hoá trị.

(7) Theo chiều tăng điện tích hạt nhân, tính khử của kim loại giảm và tính oxi hoá của phi kim tăng.

(8) Trong chu kì 2, số oxi hoá bằng số nhóm (đối với Li và Be); bằng số nhóm trừ đi 8 đối với O và F; B có nhiều trạng thái oxi hoá; Ne bằng không; C và N có mọi trạng thái oxi hoá.

10. SỰ BIẾN ĐỔI TÍNH CHẤT KIM LOẠI, PHI KIM

Trước hết, ta so sánh tính chất của kim loại và phi kim.

Kim loại	Phi kim
1. Lớp electron ngoài cùng của nguyên tử kim loại thường có từ 3 electron trở xuống.	1. Lớp electron ngoài cùng của các phi kim thường chứa từ 4 electron trở lên.
2. Dễ mất electron để tạo thành cation	2. Dễ thu electron để tạo thành anion
3. Tạo thành hợp chất ion với các phi kim	3. Tạo thành hợp chất ion với các kim loại và tạo thành hợp chất cộng hoá trị với các phi kim khác.
4. Dẫn điện tốt nhưng độ dẫn điện giảm khi nhiệt độ tăng.	4. Dẫn điện kém (trừ cacbon ở dạng graphit)
5. Dẫn nhiệt tốt	5. Cách nhiệt tốt
6. Có ánh kim	6. Không có vẻ sáng kim loại
7. Tất cả đều là chất rắn (trừ thuỷ ngân)	7. Rắn, lỏng, khí
8. Dễ dát mỏng	8. Giòn ở thể rắn
9. Dễ kéo sợi	9. Không kéo được thành sợi
10. Ở trạng thái rắn đặc trưng bằng liên kết kim loại.	10. Các phân tử cộng hoá trị, mạng nguyên tử

Trong hệ thống tuần hoàn, tính kim loại của các nguyên tố giảm từ trái sang phải và tăng từ trên xuống dưới, còn tính phi kim thì ngược lại, tăng từ trái sang phải và giảm từ trên xuống dưới.

Khuynh hướng biến đổi tính kim loại phi kim được phản ánh trong sự biến đổi tính oxi hoá - khử của các nguyên tố trong một chu kì:

Các nguyên tố biến đổi từ những chất khử mạnh (như Na, Mg) qua các nguyên tố là chất khử yếu (như Si), sau đó là chất oxi hoá yếu (như S) rồi đến chất oxi hoá mạnh (như Cl_2).

Sự biến đổi tính kim loại, phi kim còn được phản ánh ở sự biến đổi tính axit – bazơ của các oxit và hiđroxit của các nguyên tố.

Từ đầu đến cuối chu kì, tính bazơ của các oxit và hiđroxit giảm dần, đồng thời tính axit tăng dần.

CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP

3.1. Vì sao có những tính chất vật lí và hoá học biến đổi tuần hoàn, những tính chất không biến đổi tuần hoàn? Nêu dẫn chứng và giải thích.

3.2. Lấy một vài ví dụ để chứng tỏ rằng tính chất của các nguyên tử tự do của một nguyên tố có khác với tính chất của đơn chất của cùng nguyên tố đó.

3.3. Bán kính cộng hoá trị là gì? Bán kính kim loại? Bán kính Van de Van? Bán kính nguyên tử là loại bán kính nào?

3.4. Khi tạo thành cation và anion thì bán kính nguyên tử thay đổi như thế nào? Vì sao?

3.5. Quy luật biến đổi bán kính nguyên tử, bán kính ion trong hệ thống tuần hoàn? Nguyên nhân của sự biến đổi đó?

3.6. a) Sắp xếp các ion sau theo chiều giảm kích thước và giải thích lí do sắp xếp đó

1) Co^{2+}, Sr^{2+}, Mg^{2+}

2) K^+, S^{2-}, Cl^-

3) Au^+, Au^{3+}

b) Sắp xếp các ion sau theo chiều tăng kích thước; giải thích lí do:

1) Cl^-, Br^-, F^-

2) Na^+, Mg^{2+}, F^-

3) Cr^{2+}, Cr^{3+}

3.7. Sự nén Latanit là gì?

3.8. Giải thích tại sao kích thước nguyên tử của các nguyên tố chuyển tiếp rất ít thay đổi qua các chu kì?

3.9. a) Nguyên tố gali nằm dưới nguyên tố nhôm trong nhóm IIIA nhưng lại có bán kính nguyên tử nhỏ hơn. Vì sao lại có sự sai lệch trong khuynh hướng thay đổi bán kính nguyên tử?

b) Ngoài ra còn có tính chất nào của gali sai lệch với quy luật biến đổi tính chất chung?

3.10. Sắp xếp các nguyên tố sau theo chiều giảm kích thước nguyên tử:

a) Ca, Mg, Sr; b) K, Ga, Ca;

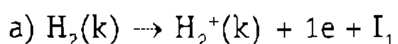
c) Br, Rb, Kr; d) Sr, Ca, Rb;

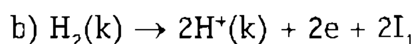
e) Se, Br, Cl; g) Xe, Ba.

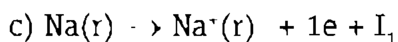
3.11. Bán kính nguyên tử, bán kính ion ảnh hưởng đến tính chất của các chất như thế nào? Nêu dẫn chứng.

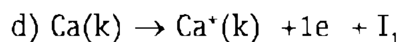
3.12. Năng lượng ion hoá là gì? Thế nào là năng lượng ion hoá thứ 1, 2, 3, ...?

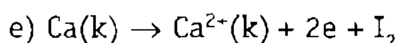
3.13. Gọi I_1, I_2, I_3 là năng lượng ion hoá thứ nhất, thứ hai, thứ ba. Hỏi những quá trình nào sau đây ghi không đúng? ý nghĩa của năng lượng ion hoá?

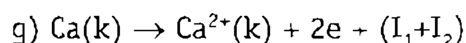

a) $H_2(k) \rightarrow H_2^+(k) + 1e + I_1$

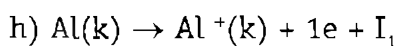

b) $H_2(k) \rightarrow 2H^+(k) + 2e + 2I_1$

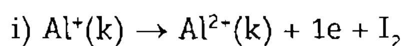

c) $Na(r) \rightarrow Na^+(r) + 1e + I_1$

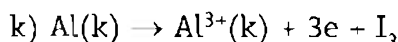

d) $Ca(k) \rightarrow Ca^+(k) + 1e + I_1$

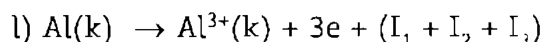

e) $Ca(k) \rightarrow Ca^{2+}(k) + 2e + I_2$


g) $Ca(k) \rightarrow Ca^{2+}(k) + 2e + (I_1+I_2)$


h) $Al(k) \rightarrow Al^+(k) + 1e + I_1$


i) $Al^+(k) \rightarrow Al^{2+}(k) + 1e + I_2$


k) $Al(k) \rightarrow Al^{3+}(k) + 3e + I_3$


l) $Al(k) \rightarrow Al^{3+}(k) + 3e + (I_1 + I_2 + I_3)$

3.14. a) Thế nào là hiệu ứng chắn? Là điện tích hiệu dụng? Sự liên quan giữa hai khái niệm này?

b) Thế nào là hiệu ứng xâm nhập? Sự liên hệ giữa hiệu ứng chắn và hiệu ứng xâm nhập?

Dựa vào hiệu ứng xâm nhập, hãy giải thích sự khác nhau về năng lượng giữa các obitan 3s, 3p và 3d trong cùng nguyên tố.

3.15. a) Gọi tên nguyên tố ở chu kì 3 có năng lượng ion hoá ở các mức liên tiếp như sau (kJ/mol). Viết cấu hình electron của nguyên tố đó.

I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6
1012	1903	2910	4936	6278	22230

b) Câu hỏi như trên đối với nguyên tố sau:

I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6
577	1816	2744	11576	14829	18375

c) Câu hỏi trên đối với nguyên tố sau:

I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	I_8
999	2251	3361	4564	7013	8495	27106	31669

Viết cấu hình electron theo obitan của các nguyên tử và ion đơn nguyên tử của nguyen tố đó.

d) Đối với mỗi nguyên tố hoá học, khi nào thì có sư thay đổi đột ngột năng lương ion hoá?

3.16. Hãy nêu quy luật biến đôi năng lượng ion hoá của các nguyên tố trong một chu kì; Trong một nhóm A; Trong một nhóm B. Giải thích nguyên nhân cua sự biến đổi đó.

Có gì khác nhau giữa sự biến đổi năng lượng ion hoá trong các nhóm A và nhóm B?

3.17. Các cực đại, cực tiểu chính và phụ trên đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của năng lượng ion hoá theo điện tích hạt nhân (đồ thị I – Z) thuộc về những nguyên tố nào?

Viết cấu hình electron của những nguyên tố đó.

3.18. Nêu những yếu tố ảnh hưởng đến năng lượng ion hoá. Hãy chứng tỏ bằng các ví dụ cụ thể.

3.19. Sự liên quan giữa năng lượng ion hoá và tính chất kim loại của các nguyên tố.

3.20. Mệnh đề: " Kim loại có năng lượng ion hoá thấp đẩy kim loại có năng lượng ion hoá cao hơn ra khỏi dung dịch nước của nó" có phải lúc nào cũng đúng không?

Nêu dẫn chứng và nói rõ lí do tại sao như vậy.

3.21. a) Năng lượng ion hoá thứ nhất của natri là 5,138 eV. Tính tần số sóng ánh sáng để có thể ion hoá một nguyên tử natri và tính độ dài sóng tương ứng.

(hằng số Planck $h = 6,626 \times 10^{-34}$J/s; tốc độ ánh sáng $c = 3,00 \times 10^{8}$m/s)

b) Giải thích tại sao năng lượng ion hoá thứ nhất của nguyên tố magie lớn hơn năng lượng ion hoá thứ nhất của natri, trong khi đó năng lượng ion hoá thứ hai của Magie lại nhỏ hơn năng lượng ion hoá thứ hai của natri.

3.22. a) Dựa vào những căn cứ nào để có thể biết được rằng: khi ion hoá các nguyên tử tự do của các nguyên tố chuyển tiếp, các electron ns bị tách ra trước các electron (n – 1)d.

b) Dựa vào bảng năng lượng ion hoá (với các giá trị I_2, I_3 của các nguyên tố), hãy nêu lên những ví dụ chứng tỏ rằng các obitan p và d nửa bão hoà đều có độ bền rõ rệt.

3.23. Ái lực với electron là gì?

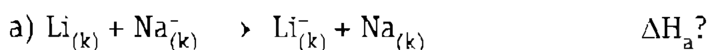
3.24. Sự liên quan giữa ái lực electron với tính phi kim của một nguyên tố.

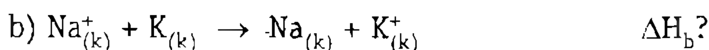
3.25. Sự biến đổi ái lực electrron của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn xảy ra như thế nào?

3.26. Mệnh đề: "Ái lực với electron của một nguyên tố càng âm[1], tính phi kim của nguyên tố đó càng mạnh" có phải bao giờ cũng đúng không?

Nêu dẫn chứng và giải thích tại sao.

3.27. Xét dấu của ΔH đối với các phản ứng sau:


a) $Li_{(k)} + Na^-_{(k)} \rightarrow Li^-_{(k)} + Na_{(k)}$ $\qquad \Delta H_a$?


b) $Na^+_{(k)} + K_{(k)} \rightarrow Na_{(k)} + K^+_{(k)}$ $\qquad \Delta H_b$?

3.28. a) Thế nào là ái lực với electron thứ nhất (E_1), thứ hai (E_2), thứ ba (E_3)...?

b) Ái lực với electron thứ hai (E_2) của oxi có giá trị dương ($E_2 > 0$), trong khi đó thì E_1 của nó lại có giá trị âm ($E_1 < 0$). Tại sao? Liệu các nguyên tố khác có $E_2 > 0$ không? Vì sao?

3.29. a) Vì sao ái lực với electron thứ nhất (E_1) của các nguyên tố thuộc chu kì 2 lại kém âm hơn E_1 của các nguyên tố cùng nhóm thuộc chu kì 3?

(1) $X_{(k)} + e \rightarrow X^-_{(k)} + E$. $E < 0 \Rightarrow$ quá trình toả nhiệt. E là ái lực với electron.

Điều đó chứng tỏ rằng các nguyên tố chu kì 3 tương ứng có tính phi kim mạnh hơn không? Vì sao?

b) Nhìn chung, trong một chu kì đi từ trái qua phải, ái lực với electron của các nguyên tố ngày càng âm. Tuy nhiên, khi đi từ nhóm IVA đến nhóm VA, thì điều đó lại không phải như vậy. Dựa vào cấu hình electron, giải thích tại sao.

3.30. Dựa vào đại lượng ái lực với electron, ta có thể biết được những tính chất gì của một nguyên tố.

3.31. a) Thế nào là độ âm điện của một nguyên tố?

b) Độ âm điện có phải là tính chất của nguyên tử tự do không?

c) Độ âm điện có phải là một hằng số đối với mỗi nguyên tố không? Nêu dẫn chứng.

3.32. Sự biến đổi độ âm điện của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

3.33. Người ta đưa ra khái niệm độ âm điện vào hoá học để giải quyết vấn đề gì?

3.34. Thế nào là một điện cực? Thế điện cực là gì? Thế điện cực tiêu chuẩn là gì?

3.35. Thế điện cực đặc trưng cho tính chất axit – bazơ, tính chất oxi hoá – khử hay khả năng tạo phức chất của một chất? Lấy ví dụ minh hoạ.

3.36. Có mối liên hệ gì giữa năng lượng ion hoá, ái lực với electron, độ âm điện của một nguyên tố và thế điện cực của một nguyên tố đó?

3.37. Thế oxi hoá là gì? Thế khử là gì? Bảng thế điện cực trình bày trong cuốn sách này là thế oxi hoá hay thế khử? Căn cứ vào đâu để nhận ra?

3.38. Sự biến đổi thế điện cực của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn?

3.39. So sánh sự biến đổi thế điện cực và sự biến đổi năng lượng ion hoá, ái lực với electron và độ âm điện của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

3.40. Cách sử dụng bảng thế điện cực. Lấy ví dụ minh hoạ.

3.41. a) Phân biệt khái niệm hoá trị và số oxi hoá của một nguyên tố hoá học. Lấy trường hợp của HNO_3 làm ví dụ.

b) Lấy 10 ví dụ về sự khác nhau giữa hoá trị của một nguyên tố và số oxi hoá của nguyên tố đó.

3.42. Sự liên quan giữa số oxi hoá và electron hoá trị của một nguyên tố. Số oxi hoá cao nhất của một nguyên tố có thể là bao nhiêu?

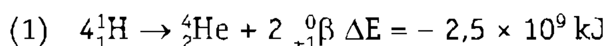
3.43. Sự biến đổi số oxi hoá của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

3.44. Vì sao lại nói: "Cộng hoá trị của các nguyên tố thuộc chu kì 2 không thể lớn hơn 4." Nêu dẫn chứng.

3.45. Cộng hoá trị tối đa của các nguyên tố có thể lớn hơn 8 không? Vì sao? Nêu dẫn chứng.

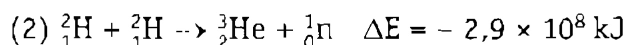
3.46. Sự liên quan giữa độ bội của số hạng quang phổ nguyên tử với hoá trị của các nguyên tố.

Hạt nhân của cả ba đồng vị của hiđro đều là nhiên liệu của phản ứng nhiệt hạch (phản ứng tổng hợp hạt nhân).

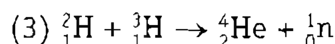


(1) $4\,^{1}_{1}H \rightarrow \,^{4}_{2}He + 2\,^{0}_{+1}\beta$ $\Delta E = -\,2,5 \times 10^{9}$ kJ

Nhiệt của phản ứng trên là nguồn năng lượng trên Mặt Trời. Đó là phản ứng khởi đầu cho việc tổng hợp các nguyên tố trong vũ trụ.



(2) $^{2}_{1}H + \,^{2}_{1}H \rightarrow \,^{3}_{2}He + \,^{1}_{0}n$ $\Delta E = -\,2,9 \times 10^{8}$ kJ



(3) $^{2}_{1}H + \,^{3}_{1}H \rightarrow \,^{4}_{2}He + \,^{1}_{0}n$

Phản ứng thứ (3) này (phản ứng tổng hợp đơteri và triti) xảy ra ở nhiệt độ thấp nhất trong số các phản ứng tổng hợp hạt nhân đã biết; tuy vậy nhiệt độ đó cũng tới khoảng 40 000 000 °C (40 triệu độ)!

Nhiệt độ cần thiết để "mồi" cho ba phản ứng trên xảy ra là từ 10^{6} tới 10^{7} độ (tức là từ 1 triệu độ tới 10 triệu độ)! Đó là nhiệt độ khi cho nổ một quả bom nguyên tử.

Ba phản ứng trên đã được dùng để chế tạo bom nhiệt hạch (thường gọi là bom H, bom khinh khí) đã được thử nghiệm nhiều lần với sức công phá khủng khiếp!

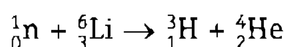
Mặt khác, các nhà khoa học vẫn không ngừng nghiên cứu tìm cách kiểm soát, khống chế nhiệt độ khổng lồ do phản ứng phát ra để dùng vào mục đích hoà bình.

Cuối năm 2005, khối cộng đồng châu Âu (EU), Trung Quốc, Mỹ, Nga, Ấn Độ, Hàn Quốc, Nhật Bản đã góp những khoản tiền khổng lồ (13 tỉ đô la) để thực hiện dự án xây dựng thử nghiệm tại miền Nam nước Pháp lò phản ứng nhiệt hạch ITER đầu tiên trên thế giới dựa trên phản ứng (3), phản ứng tổng hợp đơteri – triti.

Nếu dự án thành công, kiểm soát được phản ứng nhiệt hạch thì loài người sẽ có một nguồn năng lượng vô tận vì:

1. Nguồn cung cấp nhiên liệu đơteri là đại dương, không bao giờ cạn kiệt.

2. Triti được điều chế nhân tạo bằng cách dùng một luồng nơtron (trong lò phản ứng phân hạch) bắn vào bia liti theo phản ứng



$$^{1}_{0}n + \,^{6}_{3}Li \rightarrow \,^{3}_{1}H + \,^{4}_{2}He$$

Liti có chủ yếu trong khoáng chất aluminosilicat $LiAlS_2O_6$ khá phổ biến trên Quả Đất.

Được như vậy, nhân loại sẽ thoát khỏi sự phụ thuộc vào uranium và các nhiên liệu hoá thạch (than đá, dầu mỏ, khí đốt) đang cạn kiệt dần.

1.1.2. Vị trí của hiđro trong hệ thống tuần hoàn

Hiđro không có vị trí nào thoả đáng trong các nhóm của hệ thống tuần hoàn.

Vì chỉ có một electron hoá trị với số oxi hoá +1, nó có đủ căn cứ để được *xếp vào nhóm IA* (nhóm kim loại kiềm).

Tuy nhiên, không giống các kim loại kiềm khác, hiđro *góp chung* electron với các phi kim mà đáng lẽ nó phải mất đi. Giống như một phi kim, nó có năng lượng ion hoá rất lớn (I =13,6 eV), chẳng những lớn hơn của liti (I = 5,39 eV) mà còn lớn hơn cả năng lượng ion hoá của clo (I = 13,01 eV) là một phi kim điển hình.

Mặt khác, cũng có thể xếp hiđro *vào nhóm VIIA*. Giống như các halogen, nó tồn tại ở dạng phân tử lưỡng nguyên tử (H_2) và làm đầy lớp electron bằng hai cách:

– Hoặc là nhận electron của kim loại để tạo thành anion (ion hiđrua H^-, số oxi hoá 1).

– Hoặc là góp chung electron với phi kim.

Tuy nhiên, hiđro có độ âm điện thấp (χ = 2,1), thấp hơn bất cứ halogen nào và hơn nữa ion hiđrua H^- ít gặp lại rất hoạt động, trong khi đó các ion halogenua X^- lại rất phổ biến và bền.

Hiđro có tính chất độc đáo như trên là do kích thước của nó rất nhỏ. Nó có năng lượng ion hoá lớn là do electron rất gần hạt nhân, lại không có lớp vỏ electron chắn điện tích dương của hạt nhân. Nó có độ âm điện tương đối nhỏ (so với các phi kim) vì nó chỉ có một proton (một đơn vị điện tích dương) hút các electron liên kết.

Vì những lí do trên nên có tác giả xếp hiđro vào nhóm IA, có tác giả xếp vào nhóm VIIA và thường xếp cả vào nhóm IA và nhóm VIIA.

Trong các phần dưới đây, hiđro sẽ thể hiện như một kim loại (nhóm IA) hay một phi kim (nhóm VIIA) tuỳ theo tính chất mà ta nghiên cứu.

1.2. Sự phân loại các hiđrua (cấu trúc, tính chất, điều chế mỗi loại)

Dựa vào cấu trúc và tính chất của liên kết, người ta chia các hiđrua làm 3 loại:

– Hợp chất của hiđro với các kim loại hoạt động *khối s* là những tinh thể rắn, không dẫn điện. Đó là các *hiđrua muối* (hay *hiđrua ion*)

– Các kim loại *khối d và f* kết hợp với hiđro tạo thành các hợp chất rắn không ứng với thành phần tỉ đối (thành phần hợp thức), dẫn điện, nên được xếp vào *hiđrua kim loại*.

– Hầu hết các hợp chất của hiđro với các nguyên tố *khối p* là những hợp chất phân tử bay hơi nên được xếp vào loại hiđrua phân tử hay *hiđrua cộng hoá trị*.

Trên thực tế hiđrua của một số nguyên tố như Be, Al... không hẳn là hiđrua muối cũng như không hẳn là hiđrua phân tử mà ở trạng thái trung gian.

Bảng 4.1 trình bày hiđrua của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn.

Bảng 4.1. Các hiđrua

H_2																H_2
LiH	BeH_2											B_2H_6	C_nH_{2n+2}	NH_3	H_2O	HF
NaH	MgH_2											AlH_3	SiH_4	PH_3	H_2S	HCl
KH	CaH_2	$ScH_{<3}$	$TiH_{<2}$	$VH_{<1}$	$CrH_{<2}$	–	FeH_2	CoH_2	NiH_2	CuH	ZnH_2	GaH_3	GeH_4	AsH_3	H_2Se	HBr
RbH	SrH_2	$YH_{<3}$	$ZrH_{<2}$	$NbH_{<1}$	–	–	?	?	PdH_2	AgH	CdH_2	InH_3	SnH_4	SbH_3	H_2Te	HI
CsH	BaH_2		$HfH_{<2}$	$TaH_{<1}$	–	–	–	–	?	AuH	HgH_2	TlH_3	PbH_4	BiH_3	H_2Po	–
Các hiđrua rắn ở nhiệt độ phòng													Các hiđrua khí ở nhiệt độ phòng			

Sau đây ta xét từng loại hiđrua.

1.2.1. Hiđrua muối (hay hiđrua ion)

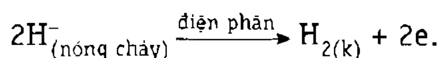
Các hiđrua nhóm IA là những tinh thể có cấu trúc kiểu NaCl và các hiđrua nhóm IIA có cấu trúc giống các halogenua kim loại nặng ($PbCl_2$).

Trong tinh thể hiđrua loại này gồm có cation kim loại và anion H^-. Bán kính ion H^- trong pha khí khoảng 2,0 Å (so với bán kính nguyên tử H là 0,53 Å), còn trong tinh thể thì thay đổi từ 1,26 Å ở LiH đến 1,54 Å trong CsH.

Sự thay đổi đó chứng tỏ, hai electron bên ngoài liên kết một cách lỏng lẻo với một đơn vị điện tích dương (một proton) trong nhân và do đó, nó dễ bị biến dạng, dễ bị nén.

Các hiđrua muối không tan trong các dung môi khan (không phải là nước) thông thường nhưng nó tan trong halogenua kim loại kiềm nóng chảy.

Điện phân dung dịch muối nóng chảy đó thì khí hiđro H_2 được giải phóng ở anot (nơi diễn ra sự oxi hoá).

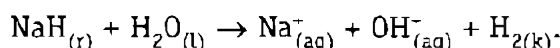


$$2H^-_{(\text{nóng chảy})} \xrightarrow{\text{điện phân}} H_{2(k)} + 2e.$$

Điều đó chứng tỏ một cách hiển nhiên sự tồn tại của ion H^-.

Phản ứng của các hiđrua muối với nước xảy ra rất mãnh liệt.

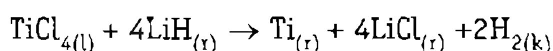
Trong nước, *ion H^- là một bazơ mạnh*, nó "đẩy" H^+ của các phân tử nước tạo thành H_2 và OH^-. Ví dụ:



$$NaH_{(r)} + H_2O_{(l)} \rightarrow Na^+_{(aq)} + OH^-_{(aq)} + H_{2(k)}.$$

Khi để hiđrua muối ở dạng chia nhỏ trong không khí ẩm, nó tự bốc cháy. Ngọn lửa này rất khó dập tắt bởi vì ngay cả CO_2 cũng bị khử khi tiếp xúc với hiđrua kim loại nóng (dĩ nhiên là không dùng nước được vì nó sẽ tạo thêm H_2). Chỉ có thể dập tắt bằng chất rắn trơ, như cát...

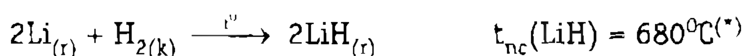
Các ion hiđrua H^- cũng là một chất khử mạnh, chẳng hạn nó khử Ti(IV) thành kim loại.



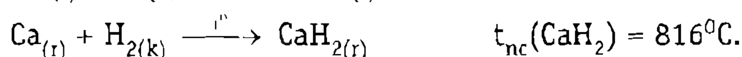
$$TiCl_{4(l)} + 4LiH_{(r)} \rightarrow Ti_{(r)} + 4LiCl_{(r)} + 2H_{2(k)}$$

Vì không có dung môi thích hợp nên ứng dụng của các hiđrua muối cũng bị hạn chế.

Có thể điều chế các hiđrua muối nhóm IA, IIA (Ca, Ba, Sr) bằng cách cho hoá hợp trực tiếp các kim loại đó với H_2.



$$2Li_{(r)} + H_{2(k)} \xrightarrow{t^0} 2LiH_{(r)} \qquad t_{nc}(LiH) = 680^0C^{(*)}$$



$$Ca_{(r)} + H_{2(k)} \xrightarrow{t^0} CaH_{2(r)} \qquad t_{nc}(CaH_2) = 816^0C.$$

Các hiđrua muối có thể dùng làm nguồn tạo ra H_2 nhưng phải bảo quản ở môi trường khô ráo.

1.2.2. Hiđrua kim loại

Nhiều nguyên tố *khối d và f* tạo thành hiđrua kim loại có công thức là MH_2 và MH_3 nhưng thường là không phù hợp với thành phần tỉ đối.

Ví dụ: $TiH_{1,7}$, $ScH_{<3}$, $VH_{<1}$, $ZrH_{1,30 \rightarrow 1,75}$.

Hầu hết các hiđrua này đều dẫn điện nên có tên là hiđrua kim loại.

Các hiđrua loại này không phản ứng với nước.

1.2.3. Hiđrua cộng hoá trị

Các nguyên tố *khối p* hoá hợp với hiđro tạo thành các phân tử có liên kết cộng hoá trị.

Tuỳ theo quan hệ độ âm điện của nguyên tố tạo hiđrua với hiđro mà hiđro thể hiện số oxi hoá âm hay dương.

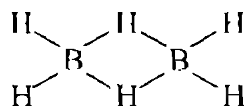
Dựa vào số electron và số liên kết trong phân tử hiđrua (theo cấu trúc Lewis (Lơuyts)), có thể chia làm ba loại hiđrua cộng hoá trị.

a) *Các hợp chất khuyết electron*

Là những hiđrua trong đó không đủ electron hoá trị để xếp thành bát tử xung quanh nguyên tử trung tâm.

Chẳng hạn phân tử điboran B_2H_6. Cấu trúc của nó cần 16 electron hoá trị để 8 nguyên tử cùng liên kết với nhau mà thực tế chỉ gồm 12 electron hoá trị.

Cấu trúc của phân tử điboran được mô tả như sau:



(*) t_{nc} (NaH) = $800^0C \approx t_{nc}$(NaCl) = 800^0C

Một cầu H và hai nguyên tử B liên kết với nhau bằng *liên kết ba tâm, hai electron*: mỗi nguyên tử B có 8 electron và mỗi nguyên tử H có một cặp electron, như vậy các obitan hoá trị của tất cả các nguyên tử đều được thoả mãn.

Liên kết cầu H ba tâm, hai electron yếu hơn liên kết ở các đầu: hai trung tâm, hai electron.

Có hai loại boran: B_nH_{n+4} và B_nH_{n+6} kém bền hơn.

Bảng 4.2. Một số hiđrua cộng hoá trị

Nhóm IIIA	Nhóm IVA	Nhóm VA	Nhóm VIA	Nhóm VIIA
B_2H_6 Điboran	CH_4 metan	NH_3 amoniac	H_2O nước	HF hiđro florua
	SiH_4 silan	PH_3 photphin	H_2S hiđro sunfua	HCl hiđro clorua
	GeH_4 giecmanan	AsH_3 arsin	H_2Se hiđro selenua	HBr hiđro bromua
	SnH_4 stanan	SbH_3 stibin	H_2Te hiđro telurua	HI hiđro iotua

b) *Các hợp chất đủ electron*

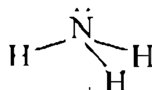
CH_4 là một ví dụ.

Tất cả các nguyên tố nhóm IVA, mỗi nguyên tử đều có bốn electron hoá trị, đều tạo thành liên kết đủ electron.

c) *Các hợp chất giàu electron*

NH_3 là một ví dụ về hợp chất giàu electron.

Trong phân tử NH_3, bốn nguyên tử chỉ liên kết với nhau bằng sáu electron hoá trị. Cặp electron dư tạo thành một cặp electron không liên kết.



Vì sao hiđro không tạo ra hợp chất với các nguyên tố từ nhóm VA đến nhóm VIIA có số oxi hoá lớn nhất ?

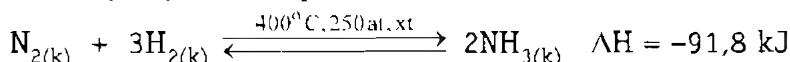
Đó là do độ âm điện của hiđro tương đối thấp. Chẳng hạn, khi kết hợp với hiđro, photpho chỉ tạo ra hiđrua PH_3 dư electron chứ không phải là PH_5 đủ electron.

Với các nguyên tố có độ âm điện lớn như clo, photpho có thể tạo ra cả PCl_3 và PCl_5 (hợp chất đủ electron).

d) *Tổng hợp các hiđrua cộng hoá trị*

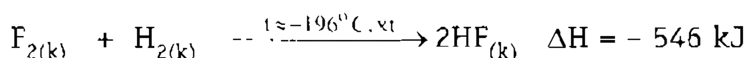
– Tổng hợp trực tiếp từ các nguyên tố :

Điều kiện tổng hợp trực tiếp các hiđrua cộng hoá trị phụ thuộc vào hoạt động hoá học của các phi kim. Chẳng hạn, với nguyên tử nitơ có liên kết ba (N ≡ N) rất bền, phải tiến hành ở nhiệt độ cao và áp suất lớn :



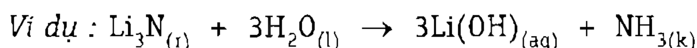
$$N_{2(k)} + 3H_{2(k)} \xrightleftharpoons{400^0C, 250at, xt} 2NH_{3(k)} \quad \Delta H = -91,8 \text{ kJ}$$

Còn đối với phi kim hoạt động như flo (F_2), phản ứng diễn ra mãnh liệt ngay ở nhiệt độ rất thấp :



$$F_{2(k)} + H_{2(k)} \xrightarrow{t \approx -196^0C, xt} 2HF_{(k)} \quad \Delta H = -546 \text{ kJ}$$

– Proton hoá một bazơ Bronstet

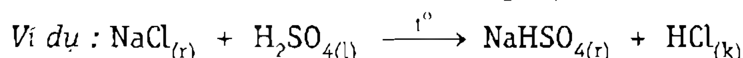


Ví dụ : $Li_3N_{(r)} + 3H_2O_{(l)} \rightarrow 3Li(OH)_{(aq)} + NH_{3(k)}$

Trong trường hợp trên thì bazơ Bronstet là ion nitrua N_3^-. Nếu để sản xuất NH_3 ở quy mô thương mại thì chất đầu Li_3N quá đắt – nhưng đây là phương pháp quan trọng trong phòng thí nghiệm để điều chế ND_3 (D là đơteri).

Nước là axit đủ mạnh để nhường proton cho bazơ N^{3-} rất mạnh.

Trong khi đó, các axit mạnh như H_2SO_4 nhường proton cho bazơ yếu Cl^-.



Ví dụ : $NaCl_{(r)} + H_2SO_{4(l)} \xrightarrow{t^0} NaHSO_{4(r)} + HCl_{(k)}$

1.3. Sự biến đổi tính axit – bazơ của các hiđrua

1.3.1. Độ bền của các hiđrua

Bảng 4.3 liệt kê năng lượng tự do tạo thành chuẩn (ΔG^0_{tt}) của các hợp chất nhị tố của hiđro với các nguyên tố khối s và khối p.

Qua bảng 4.3 ta thấy:

Có sự biến đổi đều đặn độ bền của các hiđrua.

– Tất cả hiđrua của nguyên tố *khối s* đều có $\Delta G^0_{tt} < 0$ (trừ BeH_2) và do đó *đều bền* (về mặt nhiệt động học).

– Hiđrua của tất cả các nhóm nguyên tố *khối p* có $\Delta G^0_{tt} < 0$ đều bền, nhất là hiđrua của các nguyên tố đầu họ (CH_4, NH_3, H_2O, HF).

Theo chiều từ trên xuống dưới độ bền giảm dần.

Sở dĩ như vậy là do bán kính nguyên tử tăng, sự xen phủ của hiđro với các obitan s và p của các nguyên tử liên kết yếu dần làm cho lực liên kết X – H giảm dần.

Từ nhóm IVA đến nhóm VIIA, hiđrua của các nguyên tố nặng bền dần. Chẳng hạn SnH_4 thu nhiệt mạnh, còn HI thì thu nhiệt rất ít.

Bảng 4.3. ΔG^0_{tt} (kJ/mol) của các hiđrua khối s và khối p

Chu kì	Nhóm						
	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
2	LiH (r) –68,4	BeH_2 (r) (+20)	B_2H_6 (k) +86,7	CH_4 (k) –50,7	NH_3 (k) –16,5	H_2O (l) –237,1	HF (k) 273,2
3	NaH (r) –33,5	MgH_2 (r) –35,9	AlH_3 (r) (–1)	SiH_4 (k) +56,9	PH_3 (k) +13,4	H_2S (k) –33,6	HCl (k) –95,3
4	KH (r) 36	CaH_2 (r) 147,2	GaH_3 >0	GeH_4 (k) +113,4	AsH_3 (k) +68,9	H_2Se (k) +15,9	HBr (k) –53,5
5	RbH (r) 30	SrH_2 (r) 141		SnH_4 (k) +183,3	SbH_3 (k) +147,8	H_2Te (k) >0	HI (k) +1,7
6	CsH (r) –32	BaH_2 (r) –140					

1.3.2. Phản ứng của các hiđrua với nước

Tác dụng của các hiđrua với nước phụ thuộc một cách có quy luật vào vị trí của các nguyên tố tạo hiđrua trong hệ thống tuần hoàn.

Bảng 4.4. Tóm tắt tác dụng của các hiđrua với nước

Nhóm	Nguyên tố	Tương tác với nước	Ví dụ
IA, IIA	Kim loại kiềm, kiềm thổ	Giải phóng H_2	$Na^+H^- + H^+OH^- \rightarrow H_2 + Na^+ + OH^-$ (môi trường bazơ mạnh)
IIIA, IVA	B, Si	Giải phóng H_2	$SiH_4 + 4HOH \rightarrow 4H_2 + Si(OH)_4$ (môi trường bazơ yếu)
IVA, VA	C, Ge, Sn, P, As, Sb	Không phản ứng	
VA	N	Kết hợp với H^+ của nước	$NH_3 + HOH \leftrightarrows NH_4^+ + OH^-$ (môi trường bazơ yếu)
VIA	O, S, Se, Te	Phân li theo kiểu axit	$H_2S + H_2O \leftrightarrows H_3O^+ + HS^-$ (môi trường axit yếu)
VIIA	F, Cl, Br, I	Phân li theo kiểu axit	$HCl + H_2O \rightarrow H_3O^+ + Cl^-$ (môi trường axit mạnh)

Qua bảng trên ta thấy:

Theo chiều từ trái sang phải trong hệ thống tuần hoàn, khi đi từ hiđrua ion (nhóm IA, IIA) đến hiđrua cộng hoá trị (từ nhóm IIIA đến VIIA), tính bazơ của dung dịch các hiđrua giảm dần, đồng thời tính axit tăng dần (từ môi trường bazơ mạnh đến môi trường axit mạnh).

Do tính axit – bazơ của dung dịch các hiđrua cộng hoá trị có tầm quan trọng đặc biệt về mặt lí thuyết cũng như trong thực tế nên sau đây ta nghiên cứu một cách chi tiết hơn.

1.3.3. Sự biến đổi tính axit – bazơ của các hiđrua cộng hoá trị

Bảng 4.5 sau đây cho biết trị số pK_a[1] của dung dịch các hiđrua cộng hoá trị (xác định bởi thực nghiệm).

Bảng 4.5. pK_a của dung dịch các HX

Hidrua	NH_3	H_2O	HF
pK_a	35	16	3
	PH_3	H_2S	HCl
	27	7	-7
	H_2Se	HBr	
	4	-9	
	H_2Te	HI	
	3	-10	

(Theo chiều từ trên xuống dưới: độ bền của liên kết X– H giảm, tính axit tăng.)

Độ âm điện của X tăng, độ phân cực của liên kết X – H tăng, tính axit tăng.

Qua bảng trên ta thấy:

(1) Trong một chu kì, đi từ trái sang phải, nói chung tính bazơ của dung dịch các hiđrua giảm dần, tính axit tăng dần (trị số pK_a của một số dung dịch hiđrua được ghi dưới công thức mỗi chất).

(2) Trong một nhóm A, theo chiều từ trên xuống dưới, tính axit của dung dịch các hidrua ngày càng tăng.

Đó là do tính axit của các hiđraxit (cũng như của các axit nói chung) phụ thuộc vào chỗ trong dung dịch, nguyên tử hiđro của phân tử axit dễ tách ra thành ion hiđro H^+ (đúng hơn là thành ion H_3O^+ và thường kí hiệu là $H^+.aq$) đến mức nào. Điều này phụ thuộc vào hai yếu tố:

---

(1) $pK_a = -\log K_a$
K_a là hằng số phân li axit. K_a càng lớn, pK_a càng nhỏ, tính axit càng mạnh.

– Độ phân cực của liên kết X – H càng lớn thì trong dung môi phân cực (cụ thể ở đây là nước) liên kết càng dễ đứt, H^+ càng dễ bị tách ra.

Độ phân cực của liên kết lại phụ thuộc vào độ âm điện của nguyên tố tạo hiđrua; độ âm điện của nguyên tố đó càng lớn thì độ phân cực của liên kết càng tăng.

– Độ bền của liên kết giữa phi kim và hiđro (liên kết X – H).

Độ bền của liên kết X – H càng kém thì trong dung dịch, H^+ càng dễ bị tách ra.

Từ hai yếu tố trên, ta xét:

Trong chu kì:

Đối với dãy hiđrua NH_3, H_2O, HF chẳng hạn, độ âm điện tăng dần từ N đến F, độ phân cực của liên kết N – H, O – H, F – H cũng tăng dần.

Mặt khác, bán kính nguyên tử N, O, F không khác nhau nhiều lắm, lực liên kết X– H khác nhau cũng không lớn, vì vậy mà vai trò hàng đầu ở đây là sự khác nhau về độ âm điện của các phi kim.

Vì vậy, từ NH_3 đến HF, độ phân cực của liên kết XH tăng, tính axit tăng.

Trong các nhóm A

Trong trường hợp các hiđro halogenua chẳng hạn, có sự giảm độ phân cực của liên kết H – X từ HF đến HI, nhưng do bán kính nguyên tử của flo và iot khác nhau nhiều nên độ bền của liên kết giảm dần từ HF đến HI.

Năng lượng liên kết H – F là 585,2kJ/mol, còn ở H – I là 296,80kJ, như vậy giảm tới hai lần!

(Cũng có thể dựa vào bảng 4.3 để biết độ bền của các HX:

ΔG^0_{tt} (HF)= –273,2 kJ/mol; ΔG^0_{tt} (HI)= +1,7 kJ/mol).

Do đó, ở đây tính axit tăng theo chiều giảm năng lượng liên kết H – X:

Ở trên ta đã xét sự biến đổi tính axit – bazơ của các HX dựa vào các dữ kiện thực nghiệm.

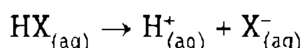
Sau đây ta sẽ nghiên cứu một cách định lượng *các yếu tố ảnh hưởng đến độ mạnh của các hiđraxit (HX)*, từ đó tính toán tìm ra pK_a của dung dịch các HX.

1.3.4. Những yếu tố ảnh hưởng đến độ mạnh của các hiđraxit (HX). Tính pK_a của dung dịch các HX

Axit HX trong dung dịch nước phân li theo phương trình:

$$HX_{(aq)} \rightarrow H^+_{(aq)} + X^-_{(aq)}$$

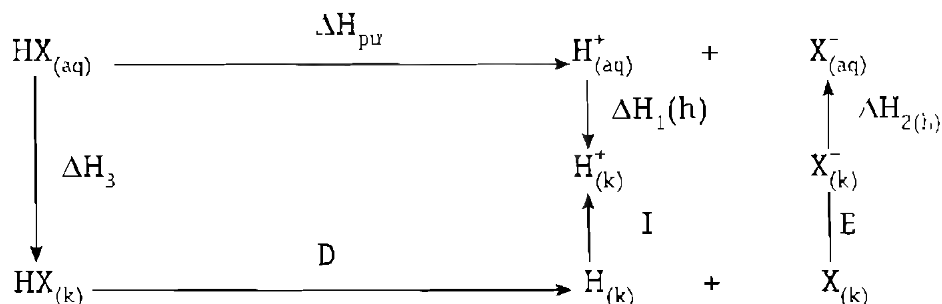
Sự biến đổi năng lượng tự do Gibbs của quá trình trên:



$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$$

a) ***Xác định ΔH^0*** (sự biến đổi entanpi của quá trình)

Có thể hình dung quá trình phân li xảy ra theo một số giai đoạn và xác định sự biến đổi năng lượng tự do của quá trình theo phương pháp chu trình Born–Haber



Trong sơ đồ trên:

D: là năng lượng phân li của phân tử khí HX.

I: là năng lượng ion hoá của hiđro.

E: là ái lực với electron của phi kim X.

ΔH_1, ΔH_2 chỉ năng lượng hiđrat hoá.

ΔH_3 là năng lượng khử hiđrat.

$\Delta H^0_{pư}$: là nhiệt của phản ứng (ở p const)

Theo chu trình trên ta có:

$$\Delta H^0_{pư} = -\Delta H_3 + D + I + \Delta H_1 + E + \Delta H_2.$$

Bảng 4.6 dưới đây ghi các số liệu cần thiết cho việc tính toán: tính ra kcal/mol.

Bảng 4.6. Một số số liệu tính toán cần thiết của các hiđro halogenua (kcal/mol)

Hiđro halogenua	HF	HCl	HBr	HI
D	134,6	103,2	87,5	71,4
E	82,2	87,3	82,0	75,7
I	315	315	315	315
$\Delta H_1 + \Delta H_2$	–384,9	-348,8	–340,7	–330,3
ΔH_3	–11,5	– 4,2	–5,0	–5,5
ΔS^0	–20,8	–13,4	–9,1	–3,2

b) ***Xác định ΔS^0*** (sự biến đổi entropi của quá trình)

Đại lượng ΔS^0 được xác định theo phương trình :

$$\Delta S^0 = S^0_{H^+_{(aq)}} + S^0_{X^-_{(aq)}} - S^0_{HX_{(aq)}}$$

Dựa vào các số liệu trên, tính được ΔG^0 của quá trình phân li các HX.

$$(\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0)$$

Hằng số phân li K_a của các axit HX liên hệ với sự biến đổi năng lượng tự do của quá trình phân li theo phương trình

$$\Delta G^0 = -RTlnK_a$$

Kết quả tính toán được dẫn ra sau đây (ở 25^0C)

Halogenua hidro	HF	HCl	HBr	HI
ΔH^0	– 3	– 13,7	– 15,2	– 14,1
$T\Delta S^0$	– 6	– 4	– 3	– 1
ΔG^0	3	– 10	– 12	– 13
pK_a tính toán	2	– 7	– 9	– 10
pK_a thực nghiệm	3	– 7	– 9	– 10

Kết quả tính toán hằng số điện li K_a theo phương pháp chu trình nêu trên phù hợp một cách đáng ngạc nhiên với kết quả xác định K_a bằng thực nghiệm (Vì trong dung dịch HF có sự tạo thành liên kết hiđro ta không xét ở đây nên kết quả chưa phù hợp tốt).

Đó là cơ sở lí thuyết giải thích sự biến đổi tính axit của các hiđraxit trong hệ thống tuần hoàn.

2. CÁC OXIT VÀ HIĐROXIT

2.1. Oxit

Oxi là nguyên tố có nhiều nhất trên mặt đất, tồn tại ở trạng thái tự do cũng như trong vô số các oxit, silicat, cacbonat, photphat... và trong nước.

Hầu hết các nguyên tố (trừ He, Ne, Ar) đều tạo thành ít nhất một oxit, trong đó nhiều nguyên tố hoá hợp trực tiếp với oxi.

Tính chất lí, hoá học của các oxit rất đa dạng và trải ra trên một diện rất rộng.

– Một số oxit ở thể khí, ngưng tụ ở nhiệt độ rất thấp như CO (nhiệt độ sôi là –192 ^0C); một số khác ở thể rắn nóng chảy ở nhiệt độ rất cao, chẳng hạn BeO (t_{nc} = 2530 ^0C).

– Về tính dẫn điện thì bao gồm chất cách điện (như MgO), chất bán dẫn (như NiO), chất dẫn điện (như ReO_3), chất siêu dẫn (như $YBa_2Cu_3O_7$).

– Một số có nhiệt tạo thành rất dương (ΔH^0_{tt}(NO)= +90,3 kJ/mol), số khác lại co nhiệt tạo thành rất âm ($\Delta H^0_{tt}(CO_2)$= –393,5 kJ/mol).

– Có những oxit rất bền đối với nhiệt (như CaO), có chất lại không bền (như HgO); có oxit rất hoạt động như Li_2O, ngược lại có chất hoạt động kém (như Fe_2O_3).

– Có oxit có tính bazơ; có oxit mang tính axit; có oxit mang cả tính axit lẫn tính bazơ; có oxit không có tính axit cũng như tính bazơ (oxit trung tính).

2.2. Phân loại các oxit và hiđroxit

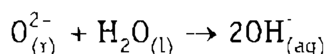
2.2.1. Các oxit

Oxit là các hợp chất nhị tố (gồm hai nguyên tố) của oxi, (kí hiệu là E – O).

a) *Các nguyên tố có độ âm điện thấp (kim loại) tạo thành oxit bazơ*

Liên kết E – O là liên kết ion.

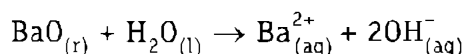
Ion O^{2-} có tính bazơ:



$$O^{2-}_{(r)} + H_2O_{(l)} \rightarrow 2OH^-_{(aq)}$$

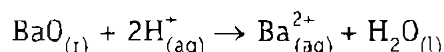
Chẳng hạn, bari tạo thành oxit bazơ BaO.

Phản ứng với nước:



$$BaO_{(r)} + H_2O_{(l)} \rightarrow Ba^{2+}_{(aq)} + 2OH^-_{(aq)}$$

Phản ứng với axit:



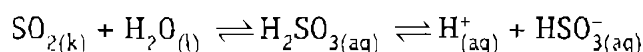
$$BaO_{(r)} + 2H^+_{(aq)} \rightarrow Ba^{2+}_{(aq)} + H_2O_{(l)}$$

b) *Các nguyên tố có độ âm điện cao (phi kim) tạo thành oxit axit*

Liên kết E – O là liên kết cộng hoá trị.

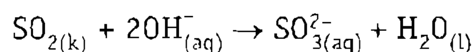
Chẳng hạn lưu huỳnh tạo thành oxit axit SO_2.

Phản ứng với nước:



$$SO_{2(k)} + H_2O_{(l)} \rightleftharpoons H_2SO_{3(aq)} \rightleftharpoons H^+_{(aq)} + HSO^-_{3(aq)}$$

Phản ứng với bazơ:

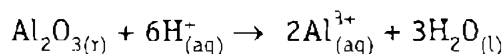


$$SO_{2(k)} + 2OH^-_{(aq)} \rightarrow SO^{2-}_{3(aq)} + H_2O_{(l)}$$

c) *Các nguyên tố có độ âm điện trung gian (một số phi kim và kim loại) tạo thành oxit lưỡng tính*

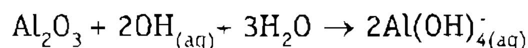
Chẳng hạn nhôm tạo thành oxit lưỡng tính Al_2O_3.

Phản ứng với axit:



$$Al_2O_{3(r)} + 6H^+_{(aq)} \rightarrow 2Al^{3+}_{(aq)} + 3H_2O_{(l)}$$

Phản ứng với bazơ:



$$Al_2O_3 + 2OH^-_{(aq)} + 3H_2O \rightarrow 2Al(OH)^-_{4(aq)}$$

Nước (H_2O) cũng được coi là oxit lưỡng tính.

Bảng 4.7. Sơ đồ phản ứng của các loại oxit với nước, axit và bazơ

Tăng tính kim loại của nguyên tố E ↑ Tăng độ âm điện của nguyên tố E

Oxit bazơ E–O Liên kết ion	$+H_2O \rightarrow$ Tăng nồng độ OH^- + axit → Muối (E_{cation}) + H_2O
Oxit lưỡng tính	+ axit → Muối (E_{cation}) + H_2O + bazơ → Muối ($E_{oxoanion}$) + H_2O
Oxit axit E–O Liên kết cộng hoá trị	+ bazơ → Muối ($E_{oxoanion}$) + H_2O + H_2O → Tăng nồng độ $H^+_{(aq)}$

Ngoài các oxit nêu trên trong đó oxi có số oxi hoá –2 (O^{-2}), còn có các peoxit, supeoxit và các oxit kiểu muối.

– *Oxit kiểu muối*:

Ví dụ: $Pb_2O_3 \equiv Pb^{2+}(\overset{+4}{Pb}O_3)^{2-}$ metaplombat chì

$Pb_3O_4 \equiv Pb_2^{2+}(\overset{+4}{Pb}O_4)^{4-}$ octhoplombat chì

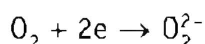
$Fe_3O_4 = Fe^{2+}(\overset{+3}{Fe}O_2)_2$ ferit sắt

– *Peoxit*: M_2O_2 (M = Na, K, Rb, Cs) và BaO_2.

– *Supeoxit*: MO_2 (M = K, Rb, Cs).

Loại	Chứa ion	Số oxi hoá
oxit	O^{2-}	–2
peoxit	O_2^{2-} $[:\ddot{O}-\ddot{O}:]^{2-}$	–1
supeoxit	O_2^- $[:\dot{O} \doteq \dot{O}:]^-$	$-\frac{1}{2}$

Tất cả các peoxit và hợp chất peoxit đều chứa ion peoxi $[O–O]^{2-}$. Ion O_2^{2-} có thể coi như sản phẩm của sự kết hợp hai electron vào phân tử oxi:



$$O_2 + 2e \rightarrow O_2^{2-}$$

2.2.2. Các hiđroxit

Hiđroxit (tức là hiđrat-oxit) được coi như sản phẩm của sự kết hợp các oxit tương ứng với nước; phản ứng kết hợp đó có thể xảy ra trực tiếp nhưng nhiều hiđroxit phải điều chế bằng cách gián tiếp.

Thường người ta chia hiđroxit thành hiđroxit-bazơ, hiđroxit axit, hiđroxit lưỡng tính.

Bazơ được coi như sản phẩm của sự kết hợp *nước với các oxit bazơ*. Bazơ có thể có một nhóm hiđroxit $(OH)^-$ như NaOH, TlOH; hai nhóm hiđroxit như $Ba(OH)_2$; ba nhóm như $Fe(OH)_3$; bốn nhóm như $Th(OH)_4$. Cho đến nay chưa biết các bazơ có năm nhóm OH^-.

Axit được coi như sản phẩm của sự kết hợp *nước với các oxit axit.* Tuỳ theo số nguyên tử hiđro trong phân tử axit có thể thay thế bằng kim loại, có thể có:

- Các axit một lần axit như HNO_3, HPO_3...
- Các axit hai lần axit như H_2SO_4, H_2CrO_4...
- Các axit ba lần axit như H_3BO_3, H_3PO_4...
- Các axit bốn lần axit như H_4SiO_4, $H_4P_2O_7$...
- Các axit năm lần axit như H_5IO_5, $H_5P_3O_{10}$...
- Các axit sáu lần axit như H_6TeO_6...

Người ta cũng đã biết dẫn xuất của axit bảy lần axit như $M^I_7PO_6$, nhưng bản thân axit thì chưa biết.

Cũng cần lưu ý rằng đối với một số axit, chỉ có một số nguyên tử hiđro (chứ không phải tất cả) có khả năng thay thế bằng kim loại, ví dụ axit photphorơ H_3PO_3 là axit hai lần axit (H_2PHO_3), axit hipophotphorơ (H_3PO_2) là axit một lần axit (HPH_2O_2) v.v...

Bảng 4.8 sau đây ghi một số phản ứng axit - bazơ điển hình của các oxit và hiđroxit với nước.

Bảng 4.8. Một số phản ứng axit – bazơ điển hình của các oxit và hiđroxit với nước

Kiểu oxit (hiđroxit)	Kí hiệu		Phản ứng điển hình
Axit mạnh	A	↓	$SO_{3(k)} + H_2O \rightarrow SO^{2-}_{4(aq)} + 2H^+_{(aq)}$
Axit yếu	a		$CO_{2(k)} + H_2O \rightleftharpoons HCO^-_{3(aq)} + H^+_{(aq)}$
Lưỡng tính (tính axit trội hơn)	L(a)		$GeO_{2(r)} + 2H_2O + 2OH^-_{(aq)} \rightarrow Ge(OH)^{2-}_6$
Lưỡng tính	L	Tính bazơ tăng dần	$Zn(OH)_{2(r)} + H^+_{(aq)} \rightarrow Zn^{2+}_{(aq)} + H_2O$ $Zn(OH)_{2(r)} + OH^- \rightarrow Zn(OH)^{2-}_{4(aq)}$
Lưỡng tính (tính bazơ trội hơn)	L(b)		$Cu(OH)_{2(r)} + H^+_{(aq)} \rightarrow Cu(OH)^-_{(aq)} + H_2O$
Bazơ yếu	b		$Fe(OH)_{2(r)} \rightleftharpoons Fe(OH)^-_{(aq)} + OH_{(aq)}$
Bazơ mạnh	B	↓	$Li_2O_{(r)} + H_2O \rightarrow 2Li^+_{(aq)} + 2OH^-_{(aq)}$
Trung tính	t		$N_2O_{(k)} + H_2O \rightarrow$ Không có phản ứng
Tạo thành "ion il"	il		$ZrO(OH)_{2(r)} + 2H^+_{(aq)} \rightarrow ZrO^+_{2(aq)} + 2H_2O$
Tạo thành poliion	p		$2CrO_{3(r)} + H_2O \rightarrow O_3CrOCrO^{2-}_{3(aq)} + 2H^+_{(aq)}$

Trong bảng trên có ba trường hợp cân bằng axit – bazơ đặc biệt (ba trường hợp cuối cùng): không phản ứng (trơ), tạo thành các ion "il" và tạo thành poliion.

– Tính trơ là do độ bền nhiệt động và (hoặc) độ bền động học có hàng rào năng lượng cao ngăn cản sự chuyển từ N_2O sang HNO hay $H_2N_2O_2$.

– Các nguyên tố ở trạng thái oxi hoá cao dễ bị thuỷ phân và tạo thành các ion âm và dương có liên kết E–O.

Các cation kiểu $ZrO^{2+}_{(aq)}$ được tạo thành trong quá trình thuỷ phân có tên là *ion il: Ion zirconil.*

Cũng tương tự như vậy khi thuỷ phân oxit U^{+6} tạo thành ion *uranil*: $UO^{+2}_{2(aq)}$.

– Đối với nhiều nguyên tố, đặc biệt là các phi kim, sự thuỷ phân tạo thành các *anionoxo*. Ví dụ, các anion oxo rất thường gặp là CO_3^{2-}, NO_3^-, PO_4^{3-}, SO_4^{2-}, ClO_4^-, CrO_4^{2-}.

Cần chú ý rằng trong tất cả các *ion il* và *ion oxo*, các nguyên tử trung tâm đều ở trạng thái oxi hoá cao.

2.3. Sự biến đổi tính axit – bazơ của các oxit và hiđroxit trong hệ thống tuần hoàn

Bảng 4.9 sau đây liệt kê oxit của các nguyên tố từ nhóm IA đến nhóm VIIA trong hệ thống tuần hoàn.

Bảng 4.9. Oxit của các nguyên tố từ nhóm IA đến nhóm VIIA trong hệ thống tuần hoàn

IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Li_2O	BeO	B_2O_3	CO_2	N_2O_5		F_2O
Na_2O	MgO	Al_2O_3	SiO_2	P_4O_{10}	SO_3	Cl_2O_7
K_2O	CaO	Ga_2O_3	GeO_2	As_2O_5	SeO_3	Br_2O_7
Rb_2O	SrO	In_2O_3	SnO_2	Sb_2O_5	TeO_3	I_2O_7
Cs_2O	BaO	Tl_2O_3	PbO_2	Bi_2O_5	PoO_3	At_2O_7

Bảng 4.10 và 4.11 sau đây trình bày tính chất của các oxit và hiđroxit của các nguyên tố thuộc chu kì 2 và chu kì 3.

Bảng 4.10. Tính chất của các oxit của các nguyên tố chu kì 2

Nhóm	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Công thức oxit	Li_2O	BeO	B_2O_3	CO_2	N_2O_5	O_2	OF_2
Trạng thái của oxit ở 20^0C	Rắn	Rắn	Rắn	Khí	Rắn	Khí	Khí
Tính dẫn điện khi nóng chảy hay oxit lỏng	Tốt	Vừa phải	Rất kém	Không	Không	Không	Không
Tác dụng trực tiếp với nước	Phản ứng tạo thành dung dịch kiềm LiOH	Không phản ứng với nước nhưng là chất lưỡng tính	Phản ứng tạo thành axit rất yếu H_3BO_3	Phản ứng tạo thành axit yếu H_2CO_3	Phản ứng tạo thành dung dịch axit HNO_3	-	OF_2 tác dụng chậm tạo thành O_2 và dung dịch axit HF
Tính chất của oxit và hiđroxit	Bazơ kiềm	Lưỡng tính	Axit rất yếu	Axit yếu	Axit mạnh		Axit trung bình

Tính bazơ yếu dần đồng thời tính axit mạnh dần →

Bảng 4.11. Tính chất các oxit của các nguyên tố chu kì 3

Nhóm	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Công thức oxit	Na_2O	MgO	Al_2O_3	SiO_2	P_2O_5	SO_3	Cl_2O_7
Trạng thái oxit ở 20^0C	Rắn	Rắn	Rắn	Rắn	Rắn	Lỏng	Lỏng
Tính dẫn điện khi nóng chảy hay oxit lỏng	Tốt	Tốt	Tốt	Rất kém	Không	Không	Không
Tác dụng trực tiếp với nước	Phản ứng tạo thành dung dịch kiềm NaOH	Có nhưng rất yếu tạo ra bazơ $Mg(OH)_2$	Không phản ứng nhưng nó là chất lưỡng tính	Không phản ứng nhưng nó là oxit axit	Phản ứng tạo thành dung dịch axit H_3PO_4	Phản ứng tạo thành dung dịch axit H_2SO_4	Phản ứng tạo thành dung dịch axit $HClO_4$
Tính chất của oxit và hiđroxit	Bazơ (kiềm)	Bazơ trung bình	Lưỡng tính	Axit yếu	Axit trung bình	Axit mạnh	Axit rất mạnh

Tính bazơ yếu dần đồng thời tính axit mạnh dần →

Qua bảng 4.10 và 4.11 trên ta thấy tính chất axit – bazơ của các oxit và hiđroxit tương ứng biến đổi theo các quy luật sau:

– *Trong một chu kì:* từ trái sang phải, tính bazơ của các oxit và hiđroxit tương ứng yếu dần, đồng thời tính axit của chúng mạnh dần.

– *Trong một nhóm A*, từ trên xuống dưới, tính bazơ của các oxit và hiđroxit tương ứng mạnh dần, đồng thời tính axit của chúng yếu dần.

Ví dụ, trong nhóm IIIA, oxit và hiđroxit của nguyên tố đầu nhóm (chu kì 2) là B_2O_3 và H_3BO_3 có tính axit, đến oxit Al_2O_3 và $Al(OH)_3$ (chu kì 3) đã có tính lưỡng tính và oxit và hiđroxit cuối nhóm Tl_2O_3 và $Tl(OH)_3$ có tính bazơ.

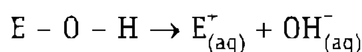
– *Trong một nhóm B,* sự biến đổi tính axit – bazơ của các oxit và hiđroxit tương ứng có phức tạp hơn.

Qua bảng 4.13 ta thấy, *đối với cùng một nguyên tố* (lấy nguyên tố Mn và Cr làm ví dụ), khi số oxi hoá tăng lên thì tính bazơ của các oxit và hiđroxit tương ứng giảm đi, đồng thời tính axit tăng lên.

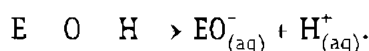
Sau đây ta sẽ giải thích nguyên nhân của sự biến đổi trên.

2.3.1. Ảnh hưởng của độ âm điện của nguyên tử trung tâm

Ta đã biết rằng trong dung môi phân cực (ở đây là H_2O), các hiđroxit E – O – H có thể phân li theo kiểu bazơ hoặc theo kiểu axit:



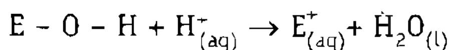
$$E - O - H \rightarrow E^+_{(aq)} + OH^-_{(aq)}$$



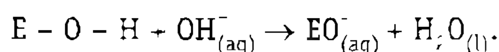
$$E - O - H \rightarrow EO^-_{(aq)} + H^+_{(aq)}.$$

Dĩ nhiên là sự phân li theo kiểu bazơ sẽ xảy ra ưu tiên hơn nếu liên kết E – O trong phân tử hiđroxit phân cực hơn liên kết O – H. Ngược lại, nếu liên kết O – H phân cực hơn liên kết E – O thì sự phân li sẽ diễn ra ưu tiên theo kiểu axit.

Nếu độ phân cực của hai liên kết trong phân tử E –O – H xấp xỉ bằng nhau thì hiđroxit sẽ có tính axit yếu hoặc bazơ yếu và đó là hiđroxit lưỡng tính. Trong môi trường axit, hiđroxit sẽ đối xử như một bazơ và trong môi trường kiềm, nó sẽ đối xử như một axit.



$$E - O - H + H^+_{(aq)} \rightarrow E^+_{(aq)} + H_2O_{(l)}$$



$$E - O - H + OH^-_{(aq)} \rightarrow EO^-_{(aq)} + H_2O_{(l)}.$$

Độ phân cực của liên kết E – O và OH trước hết phụ thuộc vào quan hệ độ âm điện của nguyên tử oxi với nguyên tử trung tâm E và của nguyên tử oxi với hiđro. Hiệu số độ âm điện của oxi và E càng lớn thì liên kết E – O càng phân cực. Trong các phân tử hiđroxit, hiệu số độ âm điện của oxi và hiđro là như nhau.

Trong mục độ âm điện (phần 3), ta đã nêu mối tương quan gần đúng giữa độ phân cực của liên kết (% tính chất ion) và hiệu số độ âm điện của hai nguyên tử tạo liên kết.

Bảng 4.12 ghi độ phân cực của liên kết E – O và O – H trong một số hợp chất.

Bảng 4.12. Độ phân cực của liên kết E – O và O – H trong một số hợp chất

Liên kết	Độ phân cực % ion	Hợp chất	Tính chất bazơ hay axit
$– O^{-2} – H^{+1}$	28		
$Na^{+1} – O – H$	66	$NaOH$	Bazơ
$– Be^{+2} – O – H$	47	$Be(OH)_2$	Lưỡng tính
$– Ca^{+2} – O – H$	63	$Ca(OH)_2$	Bazơ
$= Al^{+3} – O – H$	46	$Al(OH)_3$	Lưỡng tính
$N^{+3} – O –$	7	HNO_2	Axit
$\equiv Si^{+4} – O –$	35	H_2SiO_3	Axit yếu
$\equiv P^{+5} – O –$	29	H_3PO_4	Axit
$\equiv N^{+5} – O$	6	HNO_3	Axit mạnh
$\equiv Cr^{+6} – O$	21	H_2CrO_4	"
$\equiv S^{+6} – O –$	15	H_2SO_4	"

Qua bảng trên ta thấy:

– Nếu độ phân cực của liên kết E – O vào khoảng 35% (ứng với hiệu số độ âm điện khoảng 1,7) thì tạo thành hiđroxit lưỡng tính, thể hiện cả tính axit và tính bazơ yếu.

– Nếu độ phân cực của liên kết E – O càng lớn hơn 45% thì tính bazơ của hiđroxit càng mạnh.

– Ngược lại, nếu độ phân cực của liên kết E – O càng nhỏ hơn 45% thì tính axit của hiđroxit càng mạnh.

Tuy những trị số trên chưa thể hiện sự phụ thuộc chặt chẽ giữa tính axit – bazơ và độ phân cực của liên kết nhưng cũng cho ta một ý niệm về quy luật biến đổi tính axit – bazơ của các hiđroxit.

Như vậy, khi độ âm điện của nguyên tử trung tâm càng lớn thì tính chất cộng hoá trị của liên kết R – O càng tăng và tính chất ion của liên kết O – H cũng tăng.

a) *Trong một chu kì*

Từ trái sang phải, độ âm điện của các nguyên tố tăng dần. Chẳng hạn chu kì 3 (từ Na đến Cl)

– Nguyên tố:	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	O
– Độ âm điện χ	0,9	1,2	1,5	1,8	2,1	2,5	3,0	3,5
– Hiệu số độ âm điện $(\chi_O - \chi_E)$	2,6	2,3	2,0	1,7	1,4	1,0	0,5	

Hiệu số độ âm điện $(\chi_O - \chi_E)$ giảm dần, độ phân cực của liên kết E – O ngày càng giảm; tính bazơ của hiđroxit giảm dần, tính axit tăng dần.

b) *Trong một nhóm A*

Từ trên xuống dưới, độ âm điện của các nguyên tố giảm dần. Chẳng hạn nhóm IIA.

– Nguyên tố:	Be	Mg	Ca	Sr	Ba	O
– Độ âm điện: χ	1,5	1,2	1,0	1,0	0,9	3,5
– Hiệu số độ âm điện $(\chi_O - \chi_E)$:	2,0	2,3	2,5	2,5	2,6	

Hiệu số độ âm điện $(\chi_O - \chi_E)$ tăng dần, độ phân cực của liên kết E – O ngày càng tăng: tính bazơ của hiđroxit tăng dần, tính axit giảm dần: $Be(OH)_2$ lưỡng tính, $Ba(OH)_2$ bazơ manh.

c) *Đối với cùng một nguyên tố*

Khi số oxi hoá tăng thì độ âm điện cũng tăng. Chẳng hạn độ âm điện của Fe ở trạng thái oxi hoá +2 (Fe^{+2}) là 1,8; ở trạng thái oxi hoá +3 (Fe^{+3}) là 1,9; đối với Cu^{+} là 1,9, đối với Cu^{+2} là 2,0; đối với Sn^{+2} là 1,8, đối với Sn^{+4} là 1,9 v.v...

Do đó hiệu số độ âm điện $(\chi_O \;\; \chi_{E^{+n}})$ giảm dần, độ phân cực của liên kết E^{+n} – O ngày càng giảm: số oxi hoá tăng lên thì tính bazơ của hiđroxit giảm dần, tính axit tăng dần.

2.3.2. *Ảnh hưởng của mật độ điện tích của nguyên tử trung tâm*

Nếu nguyên tử trung tâm là ion (trong hợp chất ion) thì mật độ điện tích được tính như sau:

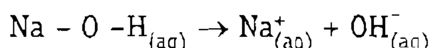
$$\text{Mật độ điện tích} = \frac{\text{điện tích cua ion}}{\frac{1}{2}\pi r^3}$$

r: là bán kính ion

Đối với hợp chất cộng hoá trị thì số oxi hoá của nguyên tử trung tâm được coi như điện tích hiệu dụng và bán kính được lấy là bán kính ion của nguyên tử có điện tích bằng số oxi hoá.

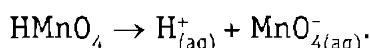
Người ta đã biết rằng, một trong những yếu tố ảnh hưởng đến độ bền tương đối của các liên kết trong phân tử hiđroxit E – O – H là mật độ điện tích dương của nguyên tử trung tâm E.

Nếu mật độ điện tích dương của nguyên tử E không lớn (đặc biệt lại kết hợp với điều kiện là các obitan bên ngoài đã đầy đủ electron) thì trong dung môi phân cực (ở đây là H_2O), liên kết E – O kém bền hơn liên kết O –H, hiđroxit phân li theo kiểu bazơ. Ví dụ:



$$Na - O - H_{(aq)} \rightarrow Na^+_{(aq)} + OH^-_{(aq)}$$

Nếu mật độ điện tích dương của nguyên tử trung tâm E khá cao sẽ làm tăng độ bền của liên kết E – O, làm tăng khuynh hướng đẩy H^+ ra khỏi phân tử hidroxit. Trong nước, hiđroxit sẽ phân li theo kiểu axit. Ví dụ:



$$HMnO_4 \rightarrow H^+_{(aq)} + MnO^-_{4(aq)}.$$

a) ***Trong một chu kì***

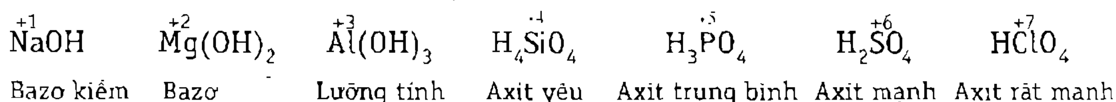
Từ trái sang phải, bán kính nguyên tử (và bán kính ion tương ứng) của các nguyên tố giảm dần. Vì vậy, *mật độ điện tích dương của nguyên tử trung tâm của các hiđroxit với số oxi hoá bằng nhau và tăng dần*. Do đó, sự phân li theo kiểu bazơ của các hiđroxit ngày càng khó khăn, sự phân li theo kiểu axit ngày càng thuận lợi.

Như vậy, trong một chu kì, từ trái sang phải, tính bazơ của các hiđroxit giảm dần, tính axit tang dần.

Nếu nguyên tử trung tâm có mật độ điện tích trung bình, cả hai liên kết E – O và O – H đều tương đối bền thì cả sự phân li theo kiểu bazơ và kiểu axit đều khó khăn. Cả tính axit và tính bazơ đều yếu. Đó là trường hợp các hiđroxit lưỡng tính.

Trường hợp nguyên tử trung tâm của các hiđroxit có số oxi hoá ứng với số nhóm.

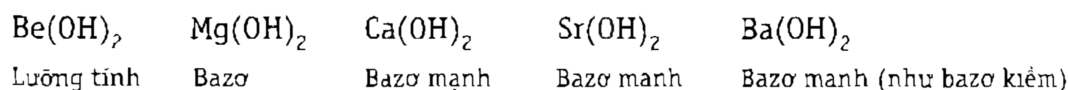
Trong một chu kì, từ trái sang phải, mật độ điện tích càng tăng nhanh hơn so với trường hợp trên, sự biến đổi tính axit – bazơ cũng theo chiều hướng trên nhưng nhanh hơn. Ví dụ các hiđroxit thuộc chu kì 3:



$\overset{+1}{Na}OH$	$\overset{+2}{Mg}(OH)_2$	$\overset{+3}{Al}(OH)_3$	$H_4\overset{+4}{Si}O_4$	$H_3\overset{+5}{P}O_4$	$H_2\overset{+6}{S}O_4$	$H\overset{+7}{Cl}O_4$
Bazơ kiềm	Bazơ	Lưỡng tính	Axit yếu	Axit trung bình	Axit mạnh	Axit rất mạnh

b) ***Trong một nhóm A***

Theo chiều từ trên xuống dưới, bán kính nguyên tử (và bán kính ion tương ứng) tăng dần. Mật độ điện tích dương của nguyên tử trung tâm của các nguyên tố có cùng số oxi hoá giảm dần. Do đó tính bazơ tăng dần, tính axit giảm dần. Ví dụ các hiđroxit thuộc nhóm IIA:



$Be(OH)_2$	$Mg(OH)_2$	$Ca(OH)_2$	$Sr(OH)_2$	$Ba(OH)_2$
Lưỡng tính	Bazơ	Bazơ mạnh	Bazơ mạnh	Bazơ mạnh (như bazơ kiềm)

c) ***Đối với một nguyên tố có nhiều trạng thái oxi hoá***

Khi số oxi hoá của một nguyên tố tăng thì có sự giảm tương ứng bán kính nguyên tử, mật độ điện tích của nguyên tử trung tâm tăng lên, do đó tính bazơ giảm dần, tính axit tăng dần.

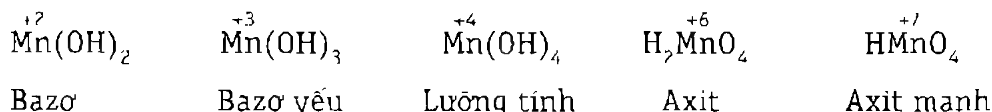
Từ đó ta hiểu được vì sao axit sunfuric $H_2\overset{+6}{S}O_4$ mạnh hơn axit sunfurơ H_2SO_3; axit nitric $H\overset{+5}{N}O_3$ mạnh hơn axit nitrơ $H\overset{+3}{N}O_2$; axit photphoric $H_3\overset{+5}{P}O_4$ mạnh hơn axit photphorơ $H_3\overset{+3}{P}O_3$...

Trong dãy oxiaxit sau của clo:



$H\overset{+1}{Cl}O$, $H\overset{+3}{Cl}O_2$, $H\overset{+5}{Cl}O_3$, $H\overset{+7}{Cl}O_4$ tính axit mạnh dần.

Trong dãy hiđroxit của mangan chẳng hạn, tính bazơ giảm, tính axit tăng dần:



$\overset{+2}{Mn}(OH)_2$	$\overset{+3}{Mn}(OH)_3$	$\overset{+4}{Mn}(OH)_4$	$H_2\overset{+6}{Mn}O_4$	$H\overset{+7}{Mn}O_4$
Bazơ	Bazơ yếu	Lưỡng tính	Axit	Axit mạnh

Bảng 4.13 trình bày sự biến đổi tính axit – bazơ của các hiđroxit của cùng một nguyên tố khi số oxi hoá tăng lên.

Bảng 4.13. Tính axit – bazơ của một số oxit và hiđroxit của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn (sự biến đổi tính axit – bazơ trong các chu kì và các nhóm)

He	Ne	Ar	Kr	Xe	Rn	
H_2O L H_2O a	F_2O	Cl_2O_7 A $HClO_3$ A $HClO_2$ a $HClO$ a	$HBrO_4$ A $HBrO_3$ A $HBrO$ a	H_5IO_6 HIO_3 A HIO a	At	
	O	SO_3 A SO_2 a	SeO_3 A SeO_2 a	H_6TeO_6 a TeO_2 a	Po	
	N_2O_5 A N_2O_3 a	P_4O_{10} A H_3PHO_3 A HPH_2O_2 A	As_2O_6 a H_3AsO_3 L(a)	H_2SbO_6 a H_3SbO_3 L(a)	Bi_2O_5 a $Bi(OH)_3$ b	
	CO_2 a	SiO_2 a	GeO_2 L(a) GeO L	$H_2Sn(OH)_6$ L(a) $Sn(OH)_3$ L	PbO_2 L(a) $Pb(OH)_2$ L	
	B_2O_3 a $H_2B_4O_9$ a	Al_2O_3 L	Ga_2O_3 L	In_2O_3 L(b)	Tl_2O_3 b Tl_2O B	
			ZnO L	CdO	HgO b Hg_2O b	
			CuO L(b) Cu_2O b	Ag_2O b	Au_2O_3 L Au_2O B	
			NiO_2 L NiO b	PdO_2 L PdO d	$H_2Pt(OH)_6$ L(a) PtO b	
			$Co(OH)_3$ b CoO b	RhO_3 a RhO_2 L RhO_3 b RhO b	IrO_3 a IrO_2 L Ir_2O_3 b	
			Fe_2O_3 L(b) $Fe(OH)_2$ b	RuO_2 L(b) Ru_2O_3 b $Ru(OH)_2$ b	OsO_4 a OsO_2 L OsO_3 b	
			Mn_2O_7 A(b) MnO_2 L $Mn(OH)_3$ b $Mn(OH)_2$ b	Te_2O_7 A	Re_2O_7 A ReO_2 L(b)	
			Cr_2O_3 A CrO_3 L $Cr(OH)_2$ b	MoO_3 A $Mo(OH)_3$ b	WO_3 a	UO_3 L(a) UO_2 b $U(OH)_2$ b
			V_2O_5 L(a) VO_2 L $V(OH)_3$ b $V(OH)_2$ b	Nb_2O_5 L(a)	Ta_2O_5 L(a)	Pa_2O_2 b
			TiO_2 L(a) $Ti(OH)_3$ b	ZrO_2 L(b)	HfO_2 b	ThO_2 b
			Sc_2O_2 b	Y_2O_3 b	Lantanit M_2O_3 b $Eu(OH)_2$ B	
	BeC L	MgO b	CaO B	SrO B	BaO B	RaO B
H_2O L	Li_2O B	Na_2O B	K_2O B	Rb_2O B	Cs_2O B	

A : Axit mạnh
a : Axit yếu
B : Bazơ mạnh
b : Bazơ yếu
L : Lưỡng tính

Ghi chú : Đối với mỗi nguyên tố, các oxit viết từ trên xuống dưới theo chiều giảm dần số oxi hóa. Theo chiều đó cũng giảm dần tính axit.

2.3.3. Ảnh hưởng của thế ion

Karlett (Caclet) đã dựa vào trị số thế ion của nguyên tử trung tâm để xét đoán tính axit - bazơ của các hiđroxit.

$$\text{Thế ion } \phi = \frac{\text{điện tích của ion trung tâm}}{\text{bán kính ion}}$$

Theo ông: Nếu $\sqrt{\phi} < 2,2$ thì hiđroxit có tính bazơ ;

Nếu $2,2 < \sqrt{\phi} < 3,2$ thì hiđroxit có tính lưỡng tính ;

Nếu $\sqrt{\phi} > 3,2$ thì hiđroxit có tính axit.

2.4. Lực axit của các oxiaxit

Việc nghiên cứu định lượng lực axit của các oxiaxit được chú ý nhiều hơn là đối với các hiđraxit.

2.4.1. Các nhóm oxiaxit

Dựa vào trị số pK của các dung dịch axit xác định bằng thực nghiệm, có thể chia các oxiaxit thành 4 nhóm khác nhau:

Bảng 4.14. Cách sắp xếp các oxiaxit

	pK_1	pK_2	pK_3	pK_4
m = 0	*n = 0*	*n = 1*		
H_4GeO_4	8,6	12,7		
H_3AsO_3	9,2	–		
H_6TeO_6	(6,2; 8,8)	10,4		
HClO	7,2	–		
HBrO	8,7	–		
(HIO)	(11,0)	–		
m = 1	*n = 1*	*n = 2*	*n = 3*	
H_3PO_4	2,1	7,2	12,0	
H_3PO_3	1,8	0,2	–	
H_3PO_2	2,0	–	–	
H_3AsO_4	2,3	7,0	13,0	
H_2SO_3	1,9	7,0	–	
H_2SeO_3	2,6	8,3	–	
H_2TeO_3	2,7	8,0	–	
$HClO_2$	2,0	–	–	
H_5IO_6	1,6	6,0	–	

	pK_1	pK_2	pK_3	pK_4
m = 2	*n* = 2	*n* = 3	*n* = 4	*n* = 5
H_2SO_4	-	1,9	–	–
H_2SeO_4	–	2,0	–	–
HIO_3	0,8	–	–	–
$H_4P_2O_7$	0,9	2,0	6,7	9,4
$H_4P_2O_6$	(2,2)	(2,8)	7,3	10,0
$H_2S_2O_4$	0,3	2,5	–	-

(m : Số nguyên tử O không tham gia các nhóm OH^- trong phân tử trung hoà.
n : Số nguyên tử O không tham gia các nhóm OH^- trong phân tử hay ion phân li.)

Qua bảng trên, ta dễ dàng thấy rằng :

– *Trong nhóm thứ nhất,* tất cả các nguyên tử oxi (O) đều liên kết với các nguyên tử hiđro (H), nghĩa là tất cả đều tạo thành nhóm OH^- (nhóm hiđroxit).

– *Trong nhóm thứ hai,* trong phân tử axit còn một nguyên tử oxi không tham gia nhóm hiđroxit.

– *Trong nhóm thứ ba và thứ tư* tiếp theo, mỗi nhóm có thêm một nguyên tử oxi không tham gia vào nhóm OH^-.

Cùng với sự tăng số nguyên tử oxi không tham gia vào nhóm OH^- (nhóm hiđroxit), có sự tăng tương ứng lực axit. Đồng thời ta cũng thấy số nhóm hiđroxit rất ít hoặc không ảnh hưởng đến lực axit.

Cho nên có thể kết luận rằng:

Vai trò chủ yếu ảnh hưởng đến lực axit của các oxiaxit là các nguyên tử oxi không tham gia vào nhóm hidroxit OH^-.

Cũng qua bảng 4.14 ở trên, ta thấy rằng:

Với cùng kiểu cấu trúc, *lực axit giảm theo chiều tăng kích thước của nguyên tử trung tâm.*

Chẳng hạn, trật tự thay đổi lực axit được minh hoạ bằng ví dụ:

Axit:	ClOH	BrOH	IOH
pK	7,2	8,7	11

2.4.2. Quan hệ giữa lực axit và cấu trúc của các oxiaxit

a) Phương pháp của Kossiakoff và Harker(Kotxiakôp và Hakơ)

Hai tác giả trên đã tìm ra mối liên hệ giản đơn giữa lực axit và đặc điểm cấu trúc của chúng. Các ông cho rằng, quá trình phân li axit gồm nhiều nấc và cần xác định sự biến đổi năng lượng tự do của mỗi nấc.

Biểu thức cuối cùng đối với sự biến đổi năng lượng tự do được xác lập như sau:

$$\Delta G = \sum_i A_i - C + RT \ln \left(\frac{n_0}{n_H}\right)$$

A_i: là công tĩnh điện thực hiện khi di chuyển một ion.

C: là hằng số đặc trưng cho dung môi.

n_0: là số nguyên tử oxi không tham gia vào nhóm hiđroxit.

n_H: là số nguyên tử hiđro trong phân tử axit bị di chuyển.

Đại lượng A_i được xác định từ biểu thức cổ điển đối với năng lượng tĩnh điện.

$$A_i = \sum_j \frac{m_j e}{\varepsilon}\left(\frac{1}{r_j} - \frac{1}{r_i}\right)$$

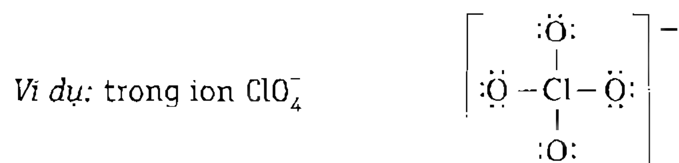
Trong đó, e là điện tích của electron; ε là hằng số điện môi của dung môi; $(r_i - r_j)$ là sự di chuyển của proton đối với nguyên tử j trong phân tử.

m_j là *điện tích hình thức của nguyên tử* thứ j.

Điện tích hình thức của nguyên tử được xác định theo quy tắc sau:

Điện tích hình thức của nguyên tử = Số nhóm của nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn – Số electron chưa liên kết xung quanh nguyên tử – $\frac{1}{2}$ (Số electron liên kết).

Ví dụ: trong ion ClO_4^-



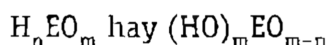
– Điện tích hình thức của nguyên tử oxi = $6 - 6 - \frac{1}{2}(2) = -1$.

– Điện tích hình thức của nguyên tử clo = $7 - 0 - \frac{1}{2}(8) = +3$.

Tổng số điện tích hình thức của các nguyên tử phải bằng điện tích của ion:

$4(-1) + 3 = -1$ (là điện tích của ion peclorat ClO_4^-).

Nói chung, các oxiaxit có thể viết dưới dạng tổng quát là:



$$H_nEO_m \text{ hay } (HO)_mEO_{m-n}$$

Điện tích hình thức của nguyên tử trung tâm E thường bằng (m – n). Theo ví dụ trên thì axit pecloric có thể viết dưới dạng $HClO_4$ hay $(OH)ClO_3$. Điện tích hình thức của nguyên tử trung tâm Cl bằng $(m - n) = 4 - 1 = +3$[1].

(1) Tuy điện tích hình thức của nguyên tử không phải là điện tích thực nhưng nó gần với thực tế hơn là số oxi hoá. Chẳng hạn, trong axit pecloric $HClO_4$, số oxi hoá của Cl là +7, điện tích hình thức là +3.

Hatemeister đã xác định được điện tích thực của nguyên tử iot trong các tinh thể KI, KIO_3, KIO_4.

	KI	KIO_3	KIO_4
Điện tích thực	–1	+0,9 ± 0,1	+1,3 ± 0,1

Tuy không trùng khớp với điện tích thực nhưng khi điện tích thực tăng lên thì điện tích hình thức cũng tăng.

Dựa vào biểu thức tính ΔG của các quá trình phân li các axit ở trên, Kossrakoff và Harker đã tính được hằng số cân bằng của 26 oxiaxit và sai lệch trung bình của các giá trị tính toán pK so với thực nghiệm không vượt quá 0,89.

Như vậy, kết quả mà hai tác giả trên thu được cũng khả quan.

b) *Phương pháp Ricci*

Năm 1948, Ricci đề ra phương pháp tính pK của các oxiaxit đơn giản hơn.

Ông cho rằng: nếu sắp xếp các oxiaxit theo điện tích hình thức của nguyên tử trung tâm và số nguyên tử oxi không tham gia nhóm OH^- trong phân tử axit thì có thể xác lập được các nhóm trị số pK.

Cách sắp xếp đó được trình bày trên bảng 4.15 sau đây.

Bảng 4.15. Các oxiaxit được sắp xếp theo điện tích hình thức của nguyên tử trung tâm

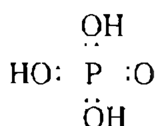
I $X(OH)_m$		II $XO(OH)_m$		III $XO_2(OH)_m$		IV $XO_3(OH)_m$	
Axit	pK	Axit	pK	Axit	pK	Axit	pK
$Te(OH)_6$	(8,8)	$PO(OH)_3$	2,1	$SO_2(OH)_2$	(–3)	$ClO_3(OH)$	(–10)
$Ge(OH)_4$	8,6	$HPO(OH)_3$	1,8	$SeO_2(OH)_2$	(–3)		
$As(OH)_3$	9,2	$H_2PO(OH)$	2,0	$IO_2(OH)$	0,8		
$Cl(OH)$	7,2	$AsO(OH)_3$	2,3	$ClO_2(OH)$	–1		
$Br(OH)$	8,7	$SO(OH)_2$	1,9	$NO_2(OH)$	–1,4		
$I(OH)$	11,0	$SeO(OH)_2$	2,6				
		$TeO(OH)_2$	2,7				
		$ClO(OH)$	2,0				
		$IO(OH)_5$	1,6				

Đối với các phân tử axit của mỗi nhóm, điện tích hình thức của nguyên tử trung tâm *m* đều như nhau và số nguyên tử oxi không tham gia nhóm hiđroxit *n* cũng như nhau.

Để tính pK của các oxiaxit, Ricci đề nghị biểu thức kinh nghiệm sau:

$$pK = 8,0 - m(9,0) + n(4,0)$$

Chẳng hạn, đối với axit octhophotphat, với công thức cấu tạo của phân tử H_3PO_4 là:



thì công thức pK ở trên với m = +1, n = 1 là:

$$pK = 8 - 9 + 4 = 3.$$

So với pK xác định bằng thực nghiệm là 2,1.

Sử dụng công thức trên, Ricci tính được pK của 36 oxiaxit với sai số trung bình giữa các trị số tính toán và thực nghiệm là 0,91.

Sai số tính toán theo phương pháp Ricci và Kossiakoff - Harker cũng gần như nhau nhưng khối lượng tính toán theo phương pháp Ricci giảm đi đáng kể.

Tuy nhiên, vì dựa vào công thức kinh nghiệm nên phương pháp Ricci không soi sáng được cơ chế của quá trình xảy ra, không giúp ta hiểu được bản chất của quá trình phân li axit.

CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP

4.1. Vì sao có tác giả xếp hiđro vào nhóm IA, có tác giả xếp vào nhóm VIIA, có tác giả lại để hiđro vào giữa bảng tuần hoàn, không xếp vào nhóm nào cả?

4.2. Vì sao lại nói: " Hiđro được sử dụng như một công cụ sắc bén để phát hiện ra quy luật biến đổi tính chất hoá học của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn"?

4.3. Có mấy loại hiđrua? Hãy cho biết tính chất của liên kết hoá học trong mỗi loại hiđrua đó.

4.4. Viết phương trình phản ứng của mỗi loại hiđrua nói trên với nước.

4.5. Nguyên tố M tác dụng với hiđro cho một chất khí. Vậy nguyên tố M là kim loại hay phi kim? Liên kết trong hợp chất đó là liên kết gì?

4.6. a) Vì sao trong nhóm VIA, theo chiều từ trên xuống dưới, tính axit tăng dần từ H_2O đến H_2Te?

b) Điều đó có đúng đối với các nhóm A khác không? Nêu dẫn chứng. Giải thích.

4.7. Sự biến đổi tính axit - bazơ của các hiđrua trong một chu kì diễn ra như thế nào? Lấy chu kì 2 làm ví dụ.

4.8. Nhận xét sau đây có đúng không?

"Trong hệ thống tuần hoàn, khi tính phi kim của nguyên tố tăng thì tính axit của hiđrua các phi kim đó cũng tăng".

(Hay nói cách khác: tính phi kim của một nguyên tố càng mạnh thì tính axit của hiđrua của nguyên tố đó càng mạnh).

Nêu dẫn chứng. Giải thích tại sao lại như vậy.

4.9. Sự biến đổi tính axit – bazơ của các oxit và hiđroxit của các nguyên tố trong một chu kì diễn ra như thế nào? (Lấy chu kì 3 làm ví dụ.)

Giải thích nguyên nhân của sự biến đổi đó.

4.10. a) Sự biến đổi tính axit – bazơ của các oxit và hiđroxit của các nguyên tố nhóm A diễn ra như thế nào (lấy nhóm IIA và VIIA làm ví dụ). Giải thích nguyên nhân của sự biến đổi đó.

b) Câu hỏi trên đối với các nhóm B.

4.11. Lấy ví dụ để chứng tỏ rằng, đối với một nguyên tố, khi số oxi hoá tăng lên thì tính bazơ của hiđroxit giảm đi, tính axit của hiđroxit tăng lên.

Giải thích nguyên nhân.

4.12. Quy luật sau đây có đúng cho mọi trường hợp không?

"Trong hệ thống tuần hoàn, khi tính phi kim của các nguyên tố tăng lên thì tính axit của các hiđroxit của các nguyên tố đó cũng tăng."

Lấy dẫn chứng. Giải thích nguyên nhân.

4.13. Hãy làm một số trắc nghiệm sau để đánh giá kĩ năng sử dụng bảng tuần hoàn:

a) Nguyên tố nào có bán kính nhỏ nhất trong nhóm (VIIA)?

b) Nguyên tố nào có bán kính lớn nhất trong chu kì 6?

c) Nguyên tố nào có bán kính nhỏ nhất trong chu kì 3?

d) Nguyên tố nào có I_1 cao nhất trong nhóm IVA?

e) Nguyên tố nào có I_1 nhỏ nhất trong chu kì 5?

f) Nguyên tố nào có tính kim loại mạnh nhất trong nhóm VA?

g) Nguyên tố nào trong nhóm IIIA tạo thành oxit bazơ mạnh nhất?

h) Nguyên tố nào trong chu kì 4 có lớp ngoài cùng đầy đủ?

i) Nguyên tố nào có cấu hình electron $[Ne]3s^2 3p^2$?

j) Nguyên tố nào có cấu hình electron $[Kr]5s^2 4d^6$?

k) Nguyên tố nào tạo thành ion +2 từ cấu hình $[Ar]3d^3$?

l) Nguyên tố nào thuộc chu kì 5 tạo thành ion 3+ với cấu hình giả khí trơ?

m) Nguyên tố chuyển tiếp nào thuộc chu kì 4 tạo thành ion 3+ có tính nghịch từ?

n) Nguyên tố chuyển tiếp nào thuộc chu kì 4 tạo thành ion 2+ có phân mức d nửa bão hoà?

4.14. Gọi tên mỗi nguyên tố sau và viết cấu hình electron của nguyên tử ở trạng thái cơ bản:

a) Kim loại yếu nhất trong chu kì 3.

b) Nguyên tố lantanit nặng nhất.

c) Nguyên tố chuyển tiếp nhẹ nhất trong chu kì 5.

d) Nguyên tố trong chu kì 3 có ion 2– đẳng electron với Ar.

4.15. Viết công thức và gọi tên các hợp chất được tạo thành từ những tương tác ion sau đây:

a) Ion 2+ và ion 1–, cả hai đều đầy electron với nguyên tử của nguyên tố khí hiếm chu kì 4.

b) Ion 2+ và ion 2–, cả hai đều đầy electron với nguyên tử khí hiếm chu kì 3.

c) Ion 2+ là ion nhỏ nhất với phân lớp d đầy đủ, anion được tạo nên từ halogen nhỏ nhất.

d) Ion được tạo nên từ các nguyên tố có kích thước lớn nhất và nhỏ nhất của chu kì 2.

4.16. Gọi tên của các nguyên tố ứng với mỗi đặc tính sau:

a) Nguyên tố có cấu hình electron $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$.

b) Nguyên tố thuộc nhóm kiềm thổ có bán kính lớn nhất.

c) Nguyên tố nhóm VA có năng lượng ion hoá thứ nhất lớn nhất.

d) Nguyên tố có ion 2+ ứng với cấu hình electron $[Kr]4d^6$.

e) Nguyên tố có ái lực với electron thấp nhất trong nhóm VIIA.

f) Nguyên tố có cấu hình electron $[Ar]3d^{10}4s^1$.

4.17. Hãy gọi tên các nguyên tố được kí hiệu là A, B, C... trong sơ đồ bảng tuần hoàn dưới đây:

	J																
B												F				I	
		K							H								G
										E							
														C			

	A												
												D	

a) Là kim loại kiềm.

b) Là nguyên tố có cấu hình d^8s^2.

c) Là những nguyên tố điển hình thuộc khối p.

d) Là những lantanit.

e) Là những nguyên tố có phân lớp f chưa đầy đủ.

g) Là halogen.

h) Là những nguyên tố điển hình thuộc khối s.

i) Là những actinit.

k) Là những nguyên tố chuyển tiếp.

l) Là những khí hiếm.

4.18. Cho sơ đồ bảng tuần hoàn sau:

1. a) Hãy đánh số các chu kì bằng chữ số Ả Rập.

Nhóm A, nhóm B bằng chữ số La Mã.

Đánh số các nhóm từ 1 đến 18 (theo bảng của IUPAC) bằng chữ số Ả Rập.

b) Hãy chia bảng tuần hoàn đó thành các khối s, p, d, f.

2. Hãy điền tên từng nguyên tố được mô tả dưới đây vào ô tương ứng trong bảng tuần hoàn.

a) Nguyên tố có bán kính nguyên tử nhỏ nhất nhóm VIA.

b) Nguyên tố có bán kính nguyên tử lớn nhất chu kì 6.

c) Nguyên tố có bán kính nguyên tử nhỏ nhất chu kì 3.

d) Nguyên tố có năng lượng ion hoá lớn nhất nhóm IVA (nhóm 14).

e) Nguyên tố có năng lượng ion hoá lớn nhất chu kì 5.

g) Nguyên tố có tính kim loại mạnh nhất nhóm VA (nhóm 15).

h) Nguyên tố tạo thành oxit bazơ mạnh nhất nhóm IIIA.

i) Nguyên tố chu kì 4 có lớp ngoài cùng đầy đủ.

k) Nguyên tố có cấu hình electron $[Ne]3s^2 3p^2$.

l) Nguyên tố có cấu hình electron $[Kr]5s^2 4d^6$.

m) Nguyên tố tạo thành ion 2+ với cấu hình electron $[Ar]3d^3$.

n) Nguyên tố chu kì 5 tạo thành ion 3+ với cấu hình electron giả bão hoà.

o) Nguyên tố chuyển tiếp chu kì 4 tạo thành ion 3+ và có tính nghịch từ.

p) Nguyên tố chuyển tiếp chu kì 4 tạo thành ion 2+ với phân lớp d nửa bão hoà.

4.19. Từ đầu thế kỉ XX, các nhà khoa học đã ghi nhận *"quan hệ theo hướng chéo"* trong bảng tuần hoàn, theo đó đặc biệt có sự tương tự về tính chất hoá học giữa một nguyên tố của chu kì 2 và một nguyên tố của chu kì 3 thuộc nhóm cao hơn.

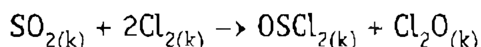
Giải thích lí do (dựa trên tính chất của nguyên tử và ion) trong mỗi trường hợp sau:

a) Tính chất hoá học của liti rất gần với tính chất của magie.

b) Tính axit của $Be(OH)_2$ rất gần với $Al(OH)_3$.

c) Tính chất hoá học của bo gần với tính chất của silic.

4.20. Khi lưu huỳnh đioxit tác dụng với clo, sản phẩm thu được là thionyl clorua $OSCl_2$ và điclo oxit.



$$SO_{2(k)} + 2Cl_{2(k)} \rightarrow OSCl_{2(k)} + Cl_2O_{(k)}$$

a) Viết cấu hình electron của nguyên tử lưu huỳnh (Z = 16).

Dựa vào đó xác định vị trí của lưu huỳnh trong hệ thống tuần hoàn (số chu kì, số nhóm, nhóm A, nhóm B).

b) Electron cuối cùng của S ứng với những số lượng tử nào?

c) Trong số các nguyên tố tham gia phản ứng trên (S, O, Cl), nguyên tố nào có năng lượng ion hoá thấp nhất? Có bán kính nhỏ nhất?

d) So sánh kích thước của nguyên tử S và ion sunfua S^{2-}.

e) Để thực hiện phản ứng viết trên đầu bài, cần cung cấp 164,6 kJ để tạo ra 1 mol $OSCl_2$. Dựa vào dữ kiện đó và vào các số liệu sau, hãy tính nhiệt tạo thành của $OSCl_2$?

Hợp chất	ΔH^0_{tt}(kJ/mol)
Cl_2O	80,3
SO_2	–296,8

PHẦN NĂM

CÁC KIỂU BẢNG TUẦN HOÀN GIỚI HẠN CỦA HỆ THỐNG TUẦN HOÀN

"... Một mặt định luật tuần hoàn giống các định luật khác ở chỗ, nó biểu thị những đặc trưng về số lượng của vật chất và mối tương quan giữa chúng, mặt khác nó lại gắn với sự phân loại thế giới động vật và thực vật, nó phản ánh ở một mức độ nhất định sự tiến hoá và mối liên hệ kế thừa..."

Sukarep (Nga) 1964

1. CÁC KIỂU BẢNG TUẦN HOÀN

Kể từ khi định luật tuần hoàn ra đời (năm 1871) đến nay, các nhà khoa học đã có nhiều cố gắng hoàn thiện cách biểu diễn định luật tuần hoàn và đã công bố khoảng trên 500 kiểu bảng tuần hoàn khác nhau.

Các kiểu bảng tuần hoàn này có thể chia thành sáu dạng với những đặc điểm riêng:

1 – Dạng ngắn;

2 – Dạng dài;

3 Dạng bậc thang;

4 – Dạng vòng xoè;

5 – Dạng xoáy ốc;

6 – Dạng chìa khoá.

Sau đây ta xét qua đặc điểm của mỗi dạng.

1.1. Dạng ngắn kiểu ô cờ (hay dạng chu kì ngắn)

(xem bảng 2.12)

Các bảng tuần hoàn dạng ngắn có những đặc điểm chung sau đây:

– Tất cả các nguyên tố được chia thành bảy chu kì và mười hàng ngang; mỗi chu kì lớn đều được chia thành hai hàng.

– Toàn bảng được chia thành tám nhóm (hoặc chín nhóm) đánh số từ nhóm I đến nhóm VIII (và một nhóm số không đối với bảng chín nhóm).

Trong mỗi nhóm lại chia thành phân nhóm chính và phân nhóm phụ. Mỗi phân nhóm được xếp lệch về một phía.

– *Các nguyên tố họ Lantan và họ Actini được đưa ra ngoài bảng chung* và xếp xuống phần dưới của bảng.

Như vậy, các nguyên tố họ s, p, d được xếp trong bảng, còn các nguyên tố họ f được xếp ra ngoài bảng.

Tuy nhiên, trong dạng này có những sự sắp xếp khác nhau về:

– Vị trí của nhóm khí hiếm.

– Vị trí của nhóm VIII.

– Vị trí của các lantanit và actinit.

Trước đây, người ta thường xếp nhóm khí hiếm vào nhóm số không (tức là nhóm thứ IX trong hệ thống tuần hoàn) với ý nghĩa là các nguyên tố khí hiếm không hoá hợp với nguyên tố nào, hoá trị luôn bằng không.

Ba bộ ba nguyên tố Fe, Co, Ni; Ru, Rh, Pd; Os, Ir, Pt được xếp vào nhóm VIII.

Như vậy, nhóm số không chỉ gồm một phân nhóm chính và nhóm số VIII chỉ gồm ba phân nhóm phụ.

Bảng tuần hoàn xếp như vậy không cân đối. Vả lại, sau khi tìm ra hợp chất của các khí hiếm, người ta thấy rằng chúng không phải có số oxi hoá bằng không như trước đây người ta vẫn tưởng.

Do đó, hiện nay người ta thường xếp 3 phân nhóm phụ nói trên và phân nhóm chính nhóm khí hiếm vào cùng nhóm VIII (Xem bảng 5.2).

– *Các nguyên tố họ Lantan và họ Actini được xếp vào trong bảng.*

Một số tác giả xếp các nguyên tố họ Lantan và họ Actini vào trong bảng chung theo các cách khác nhau:

+ Hoặc là xếp vào chu kì 6 và chu kì 7 (xem bảng 5.2).

+ Hoặc là xếp vào tất cả các nhóm. Như vậy mỗi nhóm gồm 3 phân nhóm :

Phân nhóm chính (kí hiệu là a) gồm các nguyên tố họ s, p.

Phân nhóm phụ loại 1 (kí hiệu là b) gồm các nguyên tố họ d.

Phân nhóm phụ loại 2 (kí hiệu là c) gồm các nguyên tố họ f.

Mỗi phân nhóm được xếp lệch về một phía.

Cách sắp xếp này ít phổ biến vì sử dụng không thuận tiện.

Bảng 5.1. Một kiểu bảng tuần hoàn dạng ngắn. Các nguyên tố chuyển tiếp thuộc 3 bộ ba tách thành nhóm riêng

			I	II	III	IV	V	VI	VII	0		
			H 1 1,0078							He 2 4,002	1	I
			Li 3 6,940	Be 4 9,02	B 5 10,82	C 6 12,00	N 7 14,008	O 8 16,000	F 9 19,00	Ne 10 20,183	2	II
			Na 11 22,997	Mg 12 24,32	Al 13 26,97	Si 14 28,06	P 15 31,02	S 16 32,06	Cl 17 35,457	Ar 18 39,944	3	III
			K 19 39,10	Ca 20 40,08	Sc 21 45,10	Ti 22 47,90	V 23 50,95	Cr 24 52,01	Mn 25 54,93		4	IV
Fe 26 55,84	Co 27 58,94	Ni 28 58,69	Cu 29 63,57	Zn 30 63,38	Ga 31 69,72	Ge 32 72,60	As 33 74,93	Se 34 79,2	Br 35 79,916	Kr 36 83,7	5	
			Rb 37 85,44	Sr 38 87,63	Y 39 88,92	Zr 40 91,22	Nb 41 93,3	Mo 42 96,0	Tc 43		6	V
Ru 44 101,7	Rh 45 102,91	Pd 46 106,7	Ag 47 107,880	Cd 48 112,41	In 49 114,8	Sn 50 118,70	Sb 51 121,76	Te 52 127,5	I 53 126,932	Xe 54 131,3	7	
			Cs 55 132,81	Ba 56 137,36	La 57 138,90						8	VI
		Ce 58 140,13	Pr 59 140,92	Nd 60 144,27	Il 61	Sm 62 150,43	Eu 63 152,0	Gd 64 157,3				
		Tb 65 159,2	Dy 66 162,46	Ho 67 163,5	Er 68 167,64	Tu 69 169,4	Yb 70 173,5	Lu 71 175,0				
						Hf 72 178,8	Ta 73 181,4	W 74 184,0	Re 75 186,31			
Os 76 190,8	Ir 77 193,1	Pt 78 195,23	Au 79 197,2	Hg 80 200,61	Tl 81 204,39	Pb 82 207,22	Bi 83 209,00	Po 84 210,0	85 – –	Rn 86 222	9	
			87	Ra 88 225,97	Ac 89 226	Th 90 232,12	Pa 91 230	U 92 238,14			10	VII

Bảng 5.2. Bảng tuần hoàn dạng ngắn : gồm 8 nhóm, mỗi nhóm có 3 phân nhóm (bao gồm cả các lantanit và actinit)

Chu kì	Nhóm →	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
		a b a	a c b	b c a	c b a	c b a	c b a	c b a	c b a
1	1	1 H						1 H	2 He
2	2	3 Li	4 Be	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	3	11 Na	12 Mg	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe 27 Co 28 Ni
4	5	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	6	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru 45 Rh 46 Pd
5	7	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	8	55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm
6	9		63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm
6	10		70 Yb	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os 77 Ir 78 Pt
6	11	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	12	87 Fr	88 Ra	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu
7	13		95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md
7	14		102 No	103 Lr	104 eka Hf	105 eka Ta	106	107 eka Re	108 eka Os 109 eka Ir 110 eka Pt
Các lớp electron		[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]
[illegible]		S_c	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]

Nhận xét về bảng tuần hoàn dạng ngắn:

Nhiều tác giả cho rằng: bảng tuần hoàn dạng ngắn có nhiều ưu điểm lớn:

– Nó phản ánh tốt nhất mọi mối liên hệ quan trọng nhất giữa các nguyên tố.

– Nó nêu lên được sự tuần hoàn nội tại trong một chu kì.

– Khi phân chia các phân nhóm thành chính và phụ, nó nêu lên được sự khác nhau về tính chất của các nguyên tố thuộc các phân nhóm nhưng đồng thời cũng nêu lên được sự giống nhau: số oxi hoá cao nhất của chúng bằng nhau và bằng số thứ tự của nhóm.

Tuy vậy, một số tác giả cho rằng dạng ngắn còn một số thiếu sót sau:

– Dạng ngắn không phản ánh được sự phát triển liên tục trong một chu kì (đối với các chu kì dài).

– Dạng ngắn không thể hiện được đầy đủ mức độ liên quan giữa các nguyên tố trong cùng nhóm.

– Các lantanit và actinit thực tế bị đặt ra ngoài hệ thống và không cho thấy mối liên hệ hữu cơ với các nguyên tố khác trong hệ thống.

Vì vậy, các nhà hoá học đã đề nghị những cách sắp xếp khác để biểu diễn định luật tuần hoàn.

1.2. Dạng dài (hay dạng chu kì dài)

1.2.1. Dạng dài đầu tiên: 33 cột

Dạng chu kì dài đầu tiên được nhà vật lí học Đức Röntgen (Rơnghen) đề xuất năm 1893 và được nhà hoá học Thuỵ Sĩ Werner (Vecne) hoàn thiện năm 1905.

Trong bảng tuần hoàn của Werner có 7 chu kì với số nguyên tố là 2, 8, 8, 18, 18, 33 (chu kì 7 chưa hoàn chỉnh) (xem bảng 5.3).

Trong bảng, các ô đóng khung nét đậm chỉ các nguyên tố có khối lượng nguyên tử "bất thường".

Vì lúc bấy giờ (năm 1905), chưa có những hiểu biết về cấu tạo nguyên tử làm cơ sở nên việc sắp xếp có những thiếu sót như số nguyên tố trong chu kì 6 là 33 (đúng ra phải là 32); vị trí của các nguyên tố trong bảng cũng có những nhầm lẫn như Nd và Pr phải đổi chỗ cho nhau, Ac phải thế chỗ cho La α, U phải xếp sau Th v.v...

1.2.2. Dạng dài 18 cột

Các bảng thuộc dạng này có những đặc điểm chung sau:

– Các chu kì nhỏ (2, 8 nguyên tố) và các chu kì lớn 18 nguyên tố đều được xếp thành một hàng.

– 14 nguyên tố họ f của chu kì 6 (các lantanit từ ô 58 đến ô 71) và 14 nguyên tố họ f của chu kì 7 (các actinit từ ô 90 đến ô 103) được xếp thành hai hàng riêng và được xếp xuống dưới bảng.

Bảng 5.3. Bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học dạng dài đầu tiên (do Röntgen (Đức) đề xuất và Werner (Thuỵ Sĩ) hoàn thiện)

–																																
H 1,003																															–	He 4
Li 7,03																										Be 9,1	B 11	C 12	N 4,04	O 16,00	F 19	Ne 20
Na 23,05																										Mg 24,36	Al 27,1	Si 28,4	P 31,0	S 32,06	Cl 35,45	A 39,9
K 39,15	Ca 40,1																Sc 44,1	Ti 48,1	V 51,2	Cr 52,1	Mn 55,0	Fe 55,9	Co 59,0	Ni 58,7	Cu 63,6	Zn 65,4	Ga 70	Ge 72	As 75,0	Se 79,1	Br 79,96	Kr 81,12
Rb 84,5	Sr 87,6																Y 89,0	Zr 90,7	Nb 94	Mo 96,0		Ru 101,7	Rh 103,0	Pd 106	Ag 107,93	Cd 112,4	In .14	Sn 118,5	Sb 120	Te 127,6	J 126,95	X 128
Cs 133	Ba 137,4	La 138	Ce 140	Nd 143,6	Pr 140,5	–	–	Sa 150,3	Eu 151,79	Gd 156	Tb 160	Ho 162	Er 166	–	Tu 171	Yb 173,0	–	–	Ta 183	W 184,0	–	Os 191	Ir 193,0	Pt 194,8	Au 197,2	Hg 200,3	Tl 204,1	Pb 206,9	Bi 208,5	–	–	–
–	Ra 225	La α ?	Th 232,5	–	–		–		U 239,5		–	–	–	–	Ac ?	–	–		–	–	–	–	–	–	–	–		Pb α ?	Bi α ?	Te α ?	–	–

Như vậy,

– Toàn bảng gồm có tám hàng.

– Theo cột dọc, các nguyên tố tương đồng về tính chất hoá học cũng như về cấu trúc các lớp vỏ electron của nguyên tử được xếp thành từng nhóm. Các nhóm được đánh số như sau:

+ Các nguyên tố họ s và họ p được chỉ bằng số La Mã có kèm theo chữ A.

+ Các nguyên tố họ d được kèm theo chữ B.

+ Các bộ ba nguyên tố Fe, Co, Ni; Ru, Rh, Pd; Os, Ir, Pt được xếp vào nhóm VIIIB, còn các khí hiếm được xếp vào nhóm VIIIA.

Số thứ tự của nhóm ứng với số electron hoá trị của các nguyên tố trong nhóm.

Nhận xét:

Dạng chu kì dài 18 ô thể hiện được sự phát triển liên tục cấu trúc electron của nguyên tử các nguyên tố trong một chu kì (do đó thể hiện được sự biến đổi liên tục tính chất của các nguyên tố trong chu kì).

– Thể hiện được sự tương đồng về cấu trúc electron (do đó có sự tương đồng về tính chất) của các nguyên tố trong một nhóm (A hoặc B).

– Trong bảng dài 18 ô có hai trường hợp gián đoạn trong sự sắp xếp các nguyên tố theo số thứ tự:

+ Sau nguyên tố số 57 là nguyên tố số 72.

+ Sau nguyên tố số 89 là nguyên tố số 104.

Do sự gián đoạn này, ta không sử dụng được một cách hợp lí định luật chuyển dịch khi nghiên cứu các quá trình phân huỷ phóng xạ xảy ra khi chuyển từ hạt nhân nguyên tử số 57 đến 58; từ 71 đến 72; từ 89 đến 90; từ 103 đến 104 và ngược lại.

– Về mặt hoá học, dạng bảng này không thuận lợi ở chỗ khó thấy được nguyên nhân khác nhau về tính chất hoá học của hai dãy nguyên tố được xếp trực tiếp trên dưới như:

Từ 40, 41,... , 47, 48.

Từ 72, 73, ..., 79, 80.

Ta biết rằng, dãy nguyên tố từ 72 đến 80 trong hệ thống tuần hoàn đứng ngay sau các lantanit nên chịu ảnh hưởng của *sự nén lantanit*[1]. Vì vậy, trong một cột gồm 2 nguyên tố theo chiều từ trên xuống dưới từ nguyên tố số 40 đến nguyên tố 72; từ 41 đến 73; ...; từ 48 đến 80 năng lượng ion hoá tăng, tính khử giảm và tỉ trọng của đơn chất tăng.

Chỉ có sử dụng bảng dài 32 ô mới giúp ta thấy rõ điều đó.

1.2.3. Dạng dài 32 cột

Một số tác giả cho rằng: vì số nguyên tố tối đa của chu kì lớn đã biết hiện nay (chu kì 6) là 32 nên dạng hợp lí, tự nhiên của hệ thống tuần hoàn phải là dạng chu kì dài 32 ô.

Tất cả các chu kì nhỏ và lớn (18 nguyên tố và 32 nguyên tố) đều được xếp thành một hàng. Như vậy bảng có bảy hàng ứng với bảy chu kì.

Theo cột dọc, việc đánh số tương tự như dạng dài 18 ô.

Các nguyên tố họ Lantan và họ Actini có số oxi hoá thay đổi nên hình thành hai họ riêng và không xếp vào nhóm nào nên không đánh số.

Dạng chu kì dài 32 ô khắc phục được một số thiếu sót đã nêu trên nhưng cũng như dạng dài 18 ô, dạng dài 32 ô không nêu lên được mối liên hệ giữa các nguyên tố tương đồng hoàn toàn và không hoàn toàn (ứng với các nguyên tố phân nhóm chính và phân nhóm phụ trong bảng chu kì ngắn).

(Xem bảng 5.9. Bảng tuần hoàn dạng dài 32 cột).

Kiểu bảng tuần hoàn Longuet - Higgins (Lôngghê và Hicgin)

(Xem bảng 5.10)

Trong bảng này, các tác giả tập trung sự chú ý vào thứ tự điền electron vào các phân nhóm theo chiều tăng dần trạng thái năng lượng.

Cần chú ý rằng, trong bảng tuần hoàn này, các nguyên tố chu kì 1 được xếp dưới cùng và các chu kì tiếp theo lần lượt xếp lên trên với ý nghĩa là các lớp electron bên trên ngày càng phức tạp.

Ngoài ưu điểm nói trên, bảng tuần hoàn của Longuet và Higgins không có gì mới về nguyên tắc so với các bảng chu kì dài khác.

---

(1) *Chú thích:* Sự nén lantanit không phải là một hiện tượng gì bất thường mà là sự thể hiện một quy luật chung: Khi Z tăng thêm từng đơn vị từ $_{58}Ce \rightarrow _{71}Lu$ thì electron tăng thêm được điền vào lớp thứ 3 kể từ ngoài vào, vì vậy bán kính nguyên tử giảm.

Tuy nhiên, vì electron tăng thêm được điền vào lớp thứ 3 bên trong nên ít ảnh hưởng đến sự thay đổi kích thước nguyên tử. Từ $_{58}Ce \rightarrow _{71}Lu$, qua 14 nguyên tố mà bán kính nguyên tử thay đổi có 0,09Å (r_{Ce} = 1,83Å ; r_{Lu} = 1,74Å).

Do có sự nén lantanit mà từ nhóm III trở đi, ở các nhóm B có một cặp nguyên tố có r rất gần nhau, cấu trúc electron tương tự nhau nên tính chất lí hoá rất giống nhau: Zn – Hf; Nb – Ta; Mo – W.

Bảng 5.4. Bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học

Nhóm / Chu kỳ	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB	VIIIB	VIIIB	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
1	1 H 1,008 Hiđro																[H]	2 He 4,003 Heli
2	3 Li 6,94 Liti	4 Be 9,01 Beri											5 B 10,81 Bo	6 C 12,01 Cacbon	7 N 14,007 Nitơ	8 O 15,999 Oxi	9 F 18,998 Flo	10 Ne 20,18 Neon
3	11 Na 22,989 Natri	12 Mg 24,31 Magie											13 Al 26,98 Nhôm	14 Si 28,09 Silic	15 P 30,97 Photpho	16 S 32,06 Lưu huỳnh	17 Cl 35,45 Clo	18 Ar 39,95 Agon
4	19 K 39,10 Kali	20 Ca 40,08 Canxi	21 Sc 44,96 Scanđi	22 Ti 47,90 Titan	23 V 50,94 Vanađi	24 Cr 51,996 Crom	25 Mn 54,94 Mangan	26 Fe 55,85 Sắt	27 Co 58,93 Coban	28 Ni 58,71 Niken	29 Cu 63,54 Đồng	30 Zn 65,41 Kẽm	31 Ga 69,72 Gali	32 Ge 72,64 Gemani	33 As 74,92 Asen	34 Se 78,96 Selen	35 Br 79,91 Brom	36 Kr 83,80 Kripton
5	37 Rb 85,47 Rubiđi	38 Sr 87,62 Stronti	39 Y 88,91 Ytri	40 Zr 91,22 Ziriconi	41 Nb 92,91 Niobi	42 Mo 95,94 Molipđen	43 Tc (99) Tecnexi	44 Ru 101,07 Ruteni	45 Rh 102,91 Rođi	46 Pd 106,40 Palađi	47 Ag 107,87 Bạc	48 Cd 112,41 Cađimi	49 In 114,82 Inđi	50 Sn 118,69 Thiếc	51 Sb 121,75 Antimon (Stibi)	52 Te 127,60 Telu	53 I 126,90 Iot	54 Xe 131,30 Xenon
6	55 Cs 132,91 Xesi	56 Ba 137,31 Bari	57* La 138,91 Lantan	72 Hf 178,49 Hafini	73 Ta 180,95 Tantan	74 W 183,85 Vonfam	75 Re 186,20 Reni	76 Os 190,20 Osimi	77 Ir 192,20 Iriđi	78 Pt 195,09 Platin	79 Au 196,97 Vàng	80 Hg 200,59 Thuỷ ngân	81 Tl 204,37 Tali	82 Pb 207,20 Chì	83 Bi 208,98 Bitmut	84 Po (209) Poloni	85 At (210) Atatin	86 Rn (222) Rađon
7	87 Fr [223] Franxi	88 Ra 226,03 Rađi	89** Ac [227] Actini	104 Rf [261] Rutherfordi	105 Db [262] Dubni	106 Sg [266] Seaborgi	107 Bh [264] Bohri	108 Hs [277] Hassi	109 Mt [268] Meitneri	110 Ds [271] Darmstadti								

Kim loại ← → Phi kim

Các nguyên tố s · Các nguyên tố p · Các nguyên tố d · Các nguyên tố f

* Họ Lantan	58 Ce 140,12 Xeri	59 Pr 140,91 Prazeođim	60 Nd 144,24 Neođim	61 Pm [147] Prometi	62 Sm 150,35 Samari	63 Eu 151,96 Europi	64 Gd 157,25 Gađolini	65 Tb 158,93 Tebi	66 Dy 162,50 Điprozi	67 Ho 164,93 Honmi	68 Er 167,26 Ecbi	69 Tm 168,93 Tuli	70 Yb 173,04 Ytecbi	71 Lu 174,97 Lutexi
** Họ Actini	90 Th 232,04 Thori	91 Pa 231,04 Protactini	92 U 238,03 Urani	93 Np [237] Neptuni	94 Pu [244] Plutoni	95 Am [243] Amerixi	96 Cm [247] Curi	97 Bk [247] Beckeli	98 Cf [251] Califoni	99 Es [252] Ensteini	100 Fm [257] Fecmi	101 Md [258] Menđelevi	102 No [259] Nobeli	103 Lr [260] Lorenxi

Số hiệu nguyên tử: 13 · Nguyên tử khối trung bình: 26,98 · Kí hiệu hoá học: Al · Độ âm điện: 1,61 · Tên nguyên tố: Nhôm · Cấu hình electron: [Ne] $3s^2 3p^1$ · Số oxi hoá: 3

(*) Số oxi hoá không ghi dấu là số oxi hoá dương.

Bảng 5.5. Bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học (theo IUPAC)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	n
1 H																	2 He	1
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	2
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	3
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	4
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	5
55 Cs	56 Ba	57 - 71 La-Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	6
87 Fr	88 Ra	89-103 Ac-Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Uun	111 Uun	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo	7
		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		6
		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		7

Bảng 5.6. Bảng tuần hoàn các nguyên tố dùng trong địa hoá học
(do Ferman đề nghị)

Hàng	NHÓM																	Hàng
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII			
1	–	–	–	–	–	–	1 H 1,008	2 He	3 Li 6,94	4 Be 9,02	–	–	–	–	–	–			2a
2b	–	–	5 B 10,88	6 C 12,00	7 N 14,01	8 O 16,00	9 F 19,00	10 Ne 20,18	11 Na 23,00	12 Mg 24,32	–	–	–	–	–	–			3a
3b	–	–	13 Al 26,97	14 Si 28,06	15 P 31,02	16 S 32,06	17 Cl 35,46	18 Ar 39,94	19 K 39,10	20 Ca 40,07	21 Sc 45,10	22 Ti 47,90	23 V 50,95	24 Cr 52,01	25 Mn 54,93	26 Fe 55,84	27 Co 58,94	28 Ni 58,69	4
5	29 Cu 63,57	30 Zn 65,38	31 Ga 69,72	32 Ge 72,66	33 As 74,96	34 Se 79,2	35 Br 79,92	36 Kr 82,9	37 Rb 85,46	38 Sr 87,63	39 Y 88,93	40 Zr 91,82	41 Nb 93,5	42 Mo 96,0	43 Tc ?	44 Ru 101,7	45 Rh 102,9	46 Pd 106,7	6
7	47 Ag 107,83	48 Cd 112,41	49 In 114,8	50 Sn 118,7	51 Sb 121,76	52 Te 127,5	53 I 126,93	54 Xe 130,2	55 Cs 132,81	56 Ba 137,36	57-71 TR	72 Hf 178,6	73 Ta 181,5	74 W 184,0	75 Re 186,3	76 Os 190,9	77 Ir 193,1	78 Pt 195,23	8
9	79 Au 197,2	80 Hg 200,61	81 Tl 204,39	82 Pb 207,81	83 Bi 209,0	84 Po (210)	85 At ?	86 Rn (222)	87 Fr	88 Ra 225,97	89 Ac (227)	90 Th 232,12	91 Pa (231)	92 U 238,14	–	–			10

Nhóm đất hiếm															
	57 La 138,90	58 Ce 140,13	59 Pr 140,92	60 Nd 144,27	61 Pm —	62 Sm 150,43	63 Eu 152,8	64 Gd 157,3	65 Tb 159,2	66 Dy 162,16	67 Ho 163,5	68 Er 167,67	69 Tm 169,4	70 Yb 173,5	71 Lu 175,0

Bảng 5.7. Bảng tuần hoàn Alexander

(dạng cuốn)

0
VIIb
IIIa
IVa
Va
Lathaniu
Actinide

1 H Hydro
3 Li Lithium
11 Na Sodiu
19 K Potas
37 Rb Rubid
55 Cs Caesium
87 Fr Francium

2 4,003 He Helium
10 20,179 Ne Neon
18 39,948 Ar Argon
36 83,80 Kr Krypton
54 131,30 Xe Xenon
86 222,21 Rn Radon

9 18,9984 F Fluorine
17 35,453 Cl Chlorine
35 79,904 Br Bromine
53 128,904 I Iodne
85 210 At Astatine

6,994 O Oxygen
32,6 S Sulur
29,59 Se Selenium
27,50 Te Tellurium
209 Po Polonium

0,708 Ca Calcium
87,26 Sr Stronti
137,34 Ba Barium
226,00 Ra Radium

21 44,9559 Sc Scandium
39 88,906 Y Yttrium
57 138,905 La Lathanium
89 227,0 Ac Atinium

22 47,90 Ti Titanium
40 91,22 Zr
23 50,9422424 V Vanadium
41 92,9064242 Nb
24
42

58 140 Ce Ceri
59 14 Pr Pras
60 144 Nd Neo
61 145 Pm Prometium
62 150,4 Sm Samarium
63 151,96 Eu Europium
64 157,25 Gd Gadolinium
65 Tb Terbium

90 232 Th Thorium
91 Pa Prot
92 U Uran
93 26 Np Netuni
94 244 Pu Plutonium
95 [243] Am Americium
96 247 Cm Curium
97 Bk Berkelium

ander Arrangement of the Elements
Alexander Arran

Bảng 5.8.

I A	II A	III A	IV A	V A	VI A	VII A	VIII	VIII	VIII	I B	II B	III B	IV B	V B	VI B	VII B		
								1 **H** 1,00797									2	2 **He** 4,0026
3 **Li** 6.939	4 **Be** 9,0122											5 **B** 10,511	6 **C** 12,31115	7 **N** 14,0067	8 **O** 15,9994	9 **F** 13,9984	2 8	10 **Ne** 20,197
11 **Na** 22,9895	12 **Mg** 24,305											13 **Al** 26,9815	14 **Si** 25,086	15 **P** 50,9738	16 **S** 32,064	17 **Cl** 35,453	2 8 8	18 **Ar** 39,948
19 **K** 39,102	20 **Ca** 40,03	21 **Sc** 44,956	22 **Ti** 47,90	23 **V** 50,942	24 **Cr** 51,996	25 **Mn** 54,9380	26 **Fe** 55,847	27 **Co** 58,9332	28 **Ni** 58,70	29 **Cu** 63,546	30 **Zn** 65,37	31 **Ga** 69,72	32 **Ge** 72,59	33 **As** 74,9216	34 **Se** 78,96	35 **Br** 79,904	2 8 18 8	36 **Kr** 83,80
37 **Rb** 85,47	38 **Sr** 87,62	39 **Y** 88,905	40 **Zr** 91,22	41 **Nb** 92,906	42 **Mo** 95,94	43 **Tc** [99]	44 **Ru** 101,07	45 **Rh** 102,905	46 **Pd** 106,4	47 **Ag** 107,868	48 **Cd** 112,40	49 **In** 114,32	50 **Sn** 118,69	51 **Sb** 121,75	52 **Te** 127,60	53 **I** 126,9044	2 8 18 18 8	54 **Xe** 131,30
55 **Cs** 132,905	56 **Ba** 137,34	57 **La** 138,91	72 **Hf** 178,49	73 **Ta** 180,949	74 **W** 183,85	75 **Re** 186,207	76 **Os** 190,2	77 **Ir** 22,9895	78 **Pt** 195,09	79 **Au** 195,967	80 **Hg** 200,59	81 **Tl** 204,37	82 **Pb** 207,19	83 **Bi** 208,980	84 **Po** [210]	85 **At** [210]	2 8 18 32 18 8	86 **Rn** [222]
87 **Er** [223]	88 **Ra** [226]	89 **Ac** [227]	104 **Ku** [264]															

Lantanit	58 **Ce** 140 12	59 **Pr** 140.907	60 **Nd** 144,24	61 **Pm** [147]	62 **Sm** 150,35	63 **Eu** 151,96	64 **Gd** 157,25	65 **Tb** 158,924	66 **Dy** 162,50	67 **Ho** 164,930	68 **Er** 167 26	69 **Tm** 168,934	70 **Yb** 173,04	71 **Lu** 174,97
Actinit	90 **Th** 232,038	91 **Pa** [231]	92 **U** 238.03	93 **Np** [237]	94 **Pu** [244]	95 **Am** [243]	96 **Cm** [247]	97 **Bk** [247]	98 **Cf** [252]	99 **Es** [254]	100 **Fm** [253]	101 **Md** [257]	102 **(No)** [255]	103 **Nr** [256]

Chú ý : Nguyên tố hiđro xếp ở giữa bảng (không thuộc nhóm nào)

Bảng 5.9. Bảng tuần hoàn dạng dài 32 cột

Chu kì	NHÓM																															
	IA	IIA	IIIB															IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB			IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
1																															1 H	2 He
2	3 Li	4 Be																									5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg																									13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc															22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y															40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 (No)	103 (Lr)	104 Ku	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
	s^1	s^2	d^1	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7	f^7d^1	f^9	f^{10}	f^{11}	f^{12}	f^{13}	f^{14}	$f^{14}d^1$	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}	p^1	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6
	s		d	f														d									p					

Bảng 5.10. Bảng tuần hoàn (theo Longuet và Higgins)

xếp theo thứ tự các phân mức năng lượng tăng dần.

Phân mức	Nguyên tố
1s	H He
2s	Li Be
2p	B C N O F Ne
3s	Na Mg
3p	Al Si P S Cl Ar
4s	K Ca
3d	Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn
4p	Ga Ge As Se Br Kr
5s	Rb Sr
4d	Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd
5p	In Sn Sb Te I Xe
6s	Cs Ba
	La
4f	Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu
5d	Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg
6p	Tl Pb Bi Po At Rn
7s	Fr Ra
	Ac
5f	Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md 102 103
6d	104 112
7p	113 118

1.3. Dạng bậc thang (Xem hình 5.13)

Sự sắp xếp các nguyên tố theo dạng này ở một mức độ đáng kể khắc phục được những thiếu sót đã nêu lên đối với các dạng kể trên.

Về dạng này có hai kiểu đáng chú ý:

– *Kiểu bảng do N. Bohr đề nghị*

Kiểu bảng này bao gồm một cách tự nhiên các lantanit và actinit.

– Kiểu bảng của N. Bohr được Nhêcraxôp (Nga) hoàn thiện (xem hình 5.14). Ưu điểm lớn của kiểu này là có phân biệt hai loại đồng đẳng electron:

• *Đồng đẳng toàn phần:* gồm những nguyên tố mà cấu trúc electron ngoài cùng đồng nhất ở bất cứ trạng thái oxi hoá nào.

Ví dụ trong nhóm V: N và P ; As, Sb và Bi ; V, Nb, Ta là những đồng đẳng toàn phần

• *Đồng đẳng không toàn phần:* gồm những nguyên tố mà cấu trúc lớp electron ngoài cùng chỉ đồng nhất ở một vài trạng thái oxi hoá riêng biệt.

Ví dụ cũng ở nhóm V: N và P chỉ đồng đẳng với phân nhóm V, Nb, Ta ở trạng thái oxi hoá dương cao nhất; N và P chỉ đồng đẳng với As, Sb và Bi ở các trạng thái oxi hoá -3, 0, +3.

Bảng 5.11. Đồng đẳng toàn phần

V	Nb	Ta	Hoá trị	As	Sb	Bi
			-3	2, 8, 18, 8	2, 8, 18, 18, 8	2, 8, 18, 32, 18, 8
2, 8, 11, 2	2, 8, 18, 12, 1	2, 8, 18, 32, 11, 2	0	2, 8, 18, 5	2, 8, 18, 18, 5	2, 8, 18, 32, 18, 5
2, 8, 10	2, 8, 18, 10	2, 8, 18, 32, 10	+3	2, 8, 18, 2	2, 8, 18, 18, 2	2, 8, 18, 32, 18, 2
2, 8, 8	2, 8, 18, 8	2, 8, 18, 32, 8	+5	2, 8, 18	2, 8, 18, 18	2, 8, 18, 32, 18

Bảng 5.12. Đồng đẳng không toàn phần

Hoá trị	V	P	As
-3	–	2, 8, 8	2, 8, 18, 8
0	2, 8, 11, 2	2, 8, 5	2, 8, 18, 5
+3	2, 8, 10	2, 8, 2	2, 8, 18, 2
+5	2, 8, 8	2, 8	2, 8, 18

1.4. Dạng vòng xoè (bảng 5.15)

Dạng ô cờ và dạng hình tháp có những ưu điểm và hạn chế như đã nêu trên. Ngoài ra cả hai dạng trên chưa phản ánh được sự phát triển biện chứng của hệ thống tuần hoàn, chưa giải quyết được ổn thoả việc sắp xếp nguyên tố hiđro và các "bộ ba" nguyên tố trong nhóm tám.

Để khắc phục những thiếu sót đó, một số tác giả đề nghị biểu diễn định luật tuần hoàn theo vòng xoè.

Chẳng hạn hệ thống tuần hoàn do Agaphôsin (Nga) đề nghị.

Hệ thống này có những đặc điểm sau:

– Các vòng tròn đồng tâm tương ứng với các lớp electron khác nhau.

– Hệ thống các *vòng tròn* tạo nên các *chu kì.*

– Các nguyên tố trong *nhóm* được phân bố theo các *bán kính.*

– Các chữ số Ả Rập chỉ các chu kì, chữ số La Mã chỉ các nhóm.

– Các lantanit được phân bố vào tất cả các nhóm, trừ nhóm I và II, do đó trừ nhóm I và II ra, mỗi nhóm gồm 3 phân nhóm.

Hệ thống này có nhiều ưu điểm:

– Nó phản ánh được sự phát triển theo hình xoáy ốc của vật chất.

– Nó phản ánh được cấu tạo các lớp electron s, p, d, f trong nguyên tử các nguyên tố.

– Có chú ý đến các đồng đẳng electron (toàn phần và không toàn phần).

Xếp ổn thoả được vị trí của hiđro (cả ở nhóm I và nhóm VII).

Tuy nhiên, nó còn có một số nhược điểm sau:

– Tất cả các nguyên tố cùng chu kì được phân bố trên một vòng tròn, nó không thể hiện được sự biến đổi tính chất các nguyên tố từ kim loại điển hình đến phi kim điển hình, kết thúc là khí trơ.

– Toàn bộ hệ thống không cân đối. Ở một nửa vòng tròn, tập trung hầu hết các nguyên tố từ nhóm I đến nhóm VII; còn ở nửa kia chỉ gồm các nguyên tố nhóm VIII.

– Toàn hệ thống khá phức tạp, khó theo dõi.

Bảng 5.13. Bảng tuần hoàn dạng bậc thang (theo Bohr)

1 H, 2 He

3 Li, 4 Be, 5 B, 6 C, 7 N, 8 O, 9 F, 10 Ne

11 Na, 12 Mg, 13 Al, 14 Si, 15 P, 16 S, 17 Cl, 18 Ar

19 K, 20 Ca, 21 Sc, 22 Ti, 23 V, 24 Cr, 25 Mn, 26 Fe, 27 Co, 28 Ni, 29 Cu, 30 Zn, 31 Ga, 32 Ge, 33 As, 34 Se, 35 Br, 36 Kr

37 Rb, 38 Sr, 39 Y, 40 Zr, 41 Nb, 42 Mo, 43, 44 Ru, 45 Rh, 46 Pd, 47 Ag, 48 Cd, 49 In, 50 Sn, 51 Sb, 52 Te, 53 I, 54 Xe

55 Cs, 56 Ba, 57 La, 58 Ce, 59 Pr, 60 Nd, 61 Pm, 62 Sm, 63 Eu, 64 Gd, 65 Tb, 66 Dy, 67 Ho, 68 Er, 69 Tu, 70 Yb, 71 Lu, 72 Hf, 73 Ta, 74 W, 75 Re, 76 Os, 77 Ir, 78 Pt, 79 Au, 80 Hg, 81 Tl, 82 Pb, 83 Bi, 84 Po, 85, 86 Rn

87, 88 Ra, 89 Ac, 90 Th, 91 Pa, 92 U

Các nguyên tố họ d được xếp trong khung đơn.
Các nguyên tố họ f được xếp trong khung kép.

Bảng 5.14. Bảng tuần hoàn dạng bậc thang (theo Nhêcraxôp)

(có chú ý đến đồng đẳng toàn phần và đồng đẳng không toàn phần)

VII VIII

H He 1

I II III IV V VI

2 Li Be B C N O F Ne 2

Chu kì

3 Na Mg Al Si P S Cl Ar 3

Bộ ba

4 K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr 4

5 Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe 5

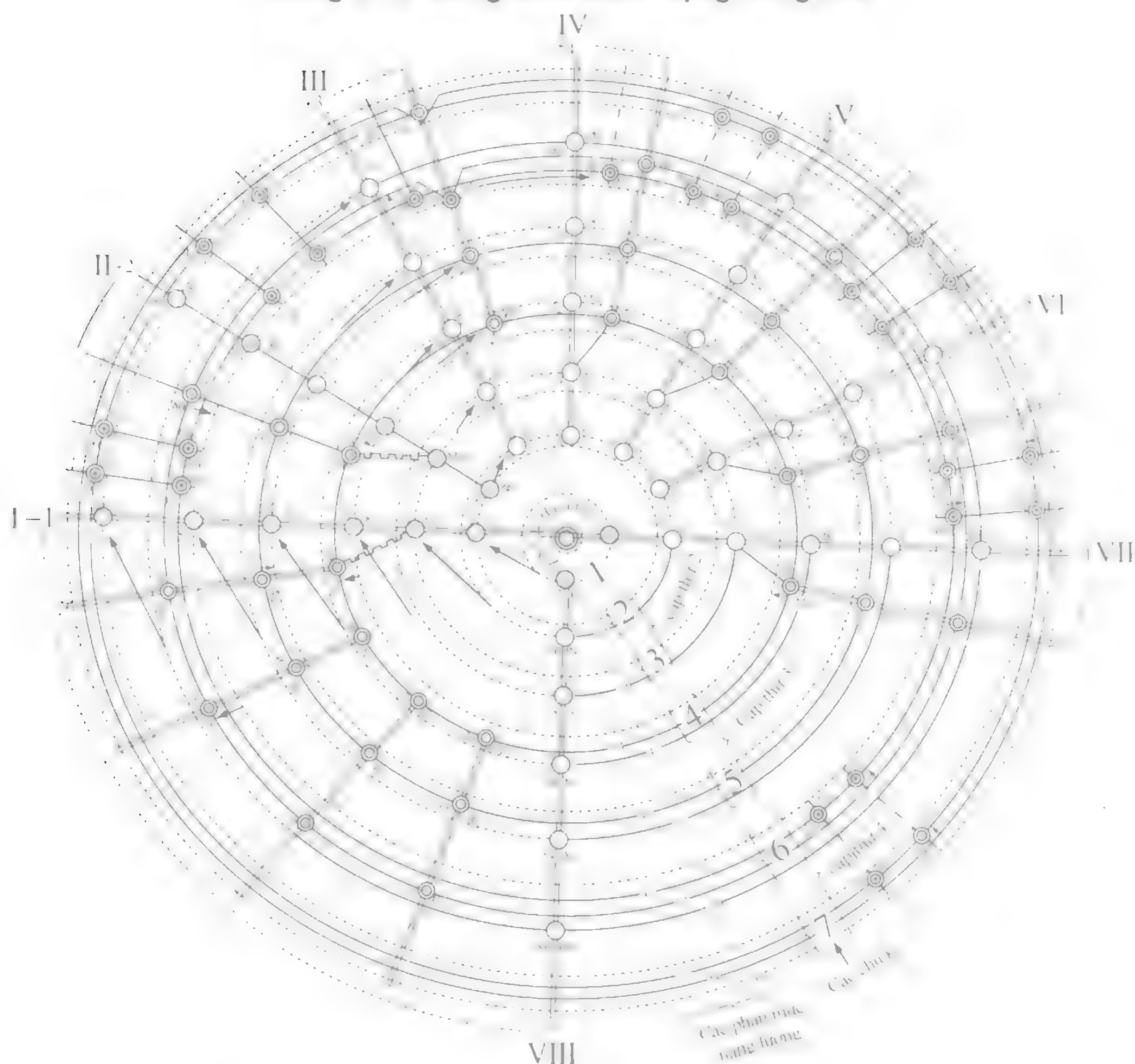
6 Cs Ba La Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn 6

4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

7 Fr Ra Ac

1 2 3

Bảng 5.15. Bảng tuần hoàn dạng vòng xoè



Các dạng đồng đẳng :

═══ Đồng đẳng toàn phần trong các trạng thái nguyên tử và ion.

= = = Đồng đẳng chỉ ở trạng thái nguyên tử.

. . . . . . Đồng đẳng chỉ ở hóa trị cao

p — Proton
n — Nơtron
⊘ — Electron (nguyên tố) s
○ " " p
◉ " " d
◎ " " f

1 — 7. Các chu kì
s, p, d, f — Các phân mức năng lượng của các electron
I — VIII — Các nhóm.

1.5. Dạng xoáy ốc (bảng 5.16)

Dạng xoáy ốc ra đời nhằm khắc phục những điểm yếu của dạng vòng xoè.

Thật ra, ngay từ năm 1863, Chancourtois (Săng-cua-toa) lần đầu tiên đã đề nghị cách sắp xếp các nguyên tố theo hình xoáy ốc. Lúc bấy giờ nhiều nguyên tố còn chưa biết và ngay cả định luật tuần hoàn cũng chưa được tìm ra.

Tuy nhiên, ngày nay một số nhà hoá học vận dụng ý tưởng của Chancourtois để xây dựng một hệ thống tuần hoàn mới.

Hệ thống này có những đặc điểm sau:

– Hiđro được xếp vào tâm của hình xoáy ốc với ý nghĩa là tất cả các nguyên tố đều được xây dựng nên từ các hạt cơ bản (electron, proton, nơtron) và hiđro là nguyên tố đơn giản nhất.

Trong hệ thống, hiđro được coi là tương đồng với các nguyên tố nhóm I cũng như nhóm VII.

– Đường xoáy ốc được chia thành tám khu vực, mỗi nhóm được xếp vào một khu vực.

– Mỗi nhóm nguyên tố gồm hai phân nhóm (trừ nhóm III có ba phân nhóm).

+ Các nguyên tố họ s và họ p thuộc phân nhóm chính.

+ Các nguyên tố họ d thuộc phân nhóm phụ loại 1.

+ Các nguyên tố họ f thuộc phân nhóm phụ loại 2 của nhóm III.

– Trong nhóm VIII, các nguyên tố phân nhóm chính là các khí hiếm, thuộc phân nhóm phụ là các bộ ba (Fe, Co, Ni; Ru, Rh, Pd; Os, Ir, Pt).

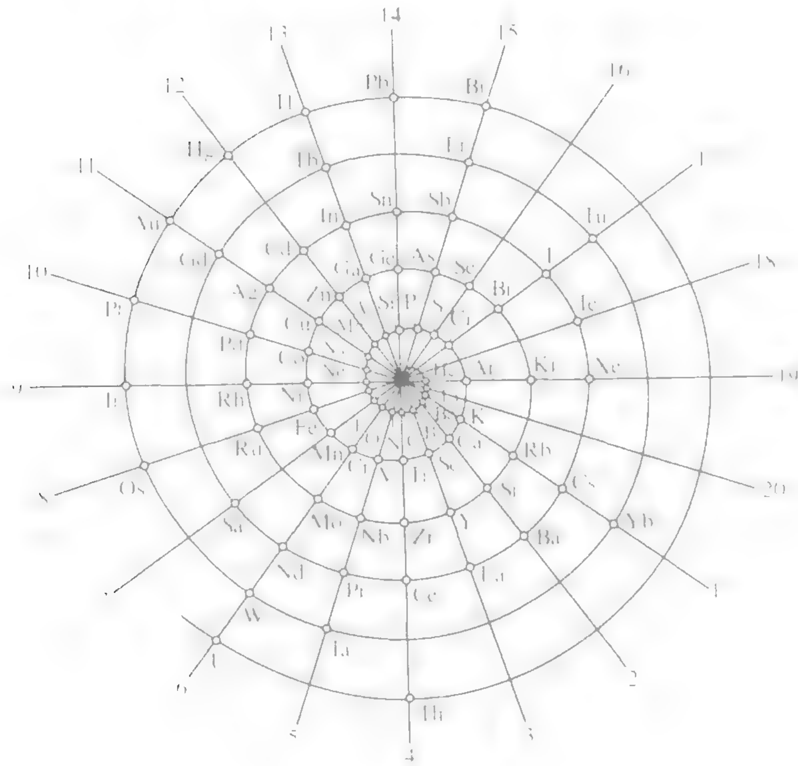
– Ở nhóm IV, tính chất của các nguyên tố thuộc phân nhóm chính và phân nhóm phụ giống nhau nhiều nhất.

Càng xa nhóm IV về phía nhóm I và về phía nhóm VIII, tính chất các nguyên tố thuộc hai phân nhóm đó ngày càng khác nhau. Điều đó được thể hiện bằng những góc khác nhau giữa các bán kính trên đó sắp xếp các nguyên tố giữa hai nhóm.

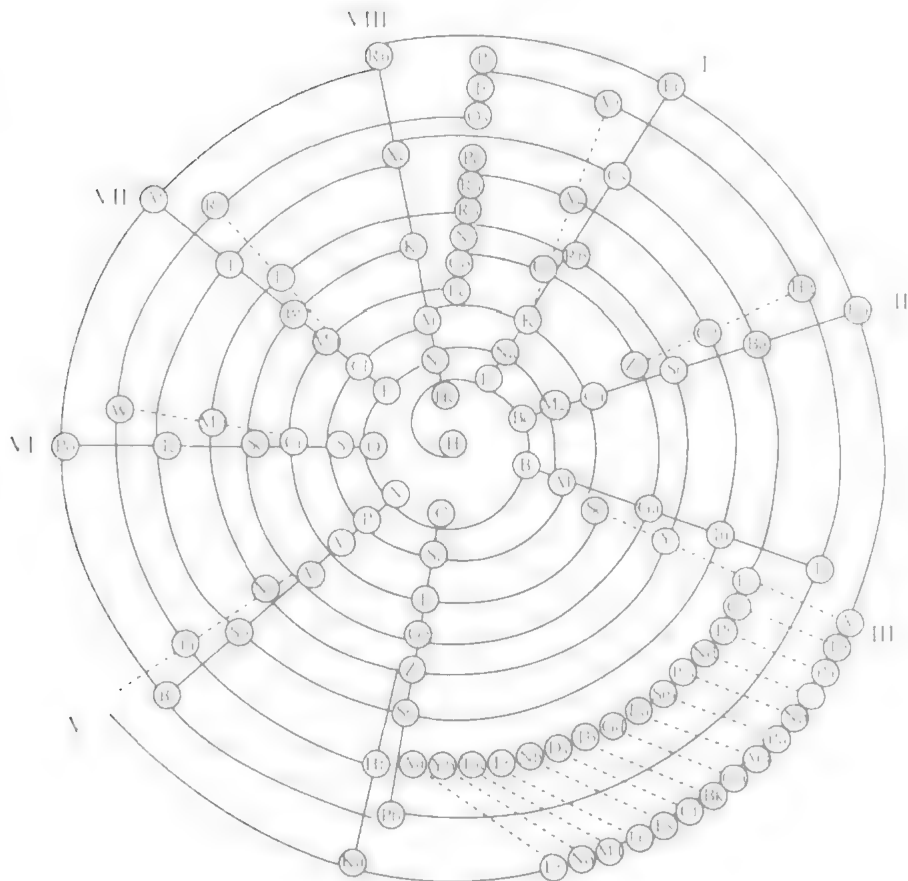
– Tất ca các nguyên tố trong hệ thống đều được sắp xếp trên những đường xoáy ốc, điều đó phản ánh tính chất biện chứng của định luật tuần hoàn. Cuối mỗi chu kì và bắt đầu một chu kì mới, có sự chuyển lên một vòng mới.

Bảng 5.16. Bảng tuần hoàn dạng xoáy ốc

a)



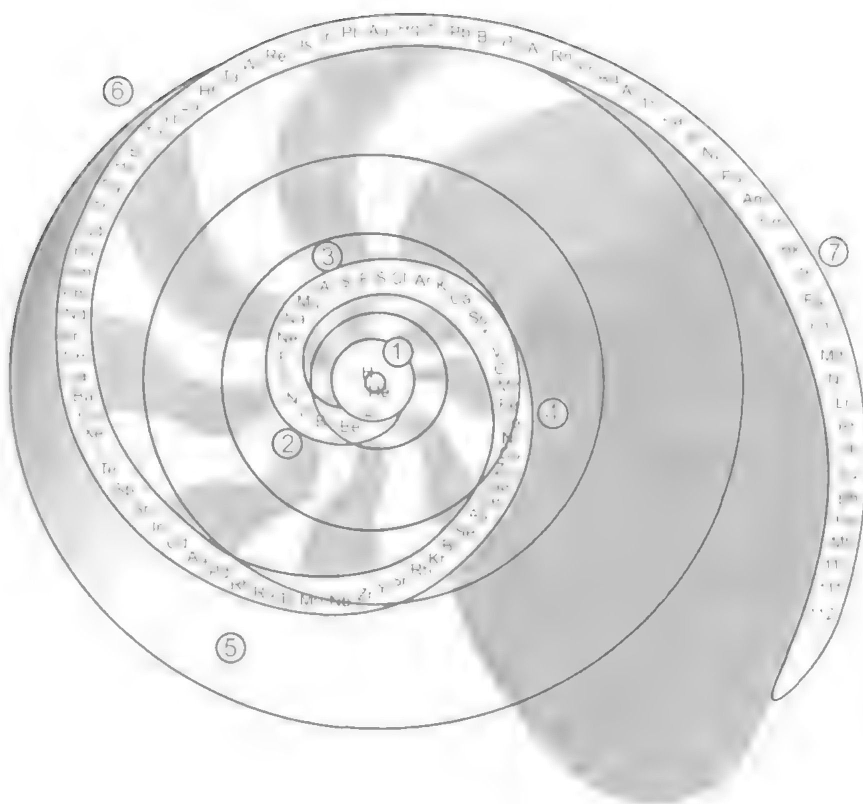
b)



c)

Bảng tuần hoàn do F.A.Gooch và C. F. Walker xây dựng mô phỏng theo vỏ con ốc anh vũ để thể hiện ý tưởng sau:

"Trong tự nhiên, từ sự chuyển động của các vì tinh tú, từ sự sắp xếp những cánh hoa hướng dương,... cho đến vỏ con ốc nhỏ bé trong biển cả... đâu đâu cũng hiển hiện sự tuần hoàn.



Bảng 5.17. Bảng tuần hoàn dạng xoáy ốc (có xét tới phân mức 5g)

1.6. Dạng chìa khoá

Hệ thống tuần hoàn dạng chìa khoá phát triển dạng xoáy ốc nói trên.

Có ba kiểu bảng phổ biến thuộc dạng này.

1.6.1. Kiểu bảng (a) (xem bảng 5.18)

Do nhà hoá học người Pháp là Chacles Janet (Saclơ Gianê) lần đầu tiên đề nghị năm 1928. Trong bảng:

– Các nguyên tố họ s và họ p được xếp trên các vòng xoáy ốc và được đánh số từ 0, Ia, ... đến VIIa.

– Các nguyên tố họ d (các nguyên tố chuyển tiếp) được xếp trên một ngạnh của chìa khoá và được đánh số từ Ib đến VIIb.

– Các nguyên tố họ f (các lantanit và actinit) được xếp trên một ngạnh khác và được đanh số từ Ic đến VIIc.

1.6.2. Kiểu bảng (b) (xem bảng 5.19)

Về cơ bản giống bảng (a) nhưng thêm ngạnh thứ ba gồm 18 ô để xếp các nguyên tố họ 5g.

1.6.3. Kiểu bảng (c) (xem bảng 5.20)

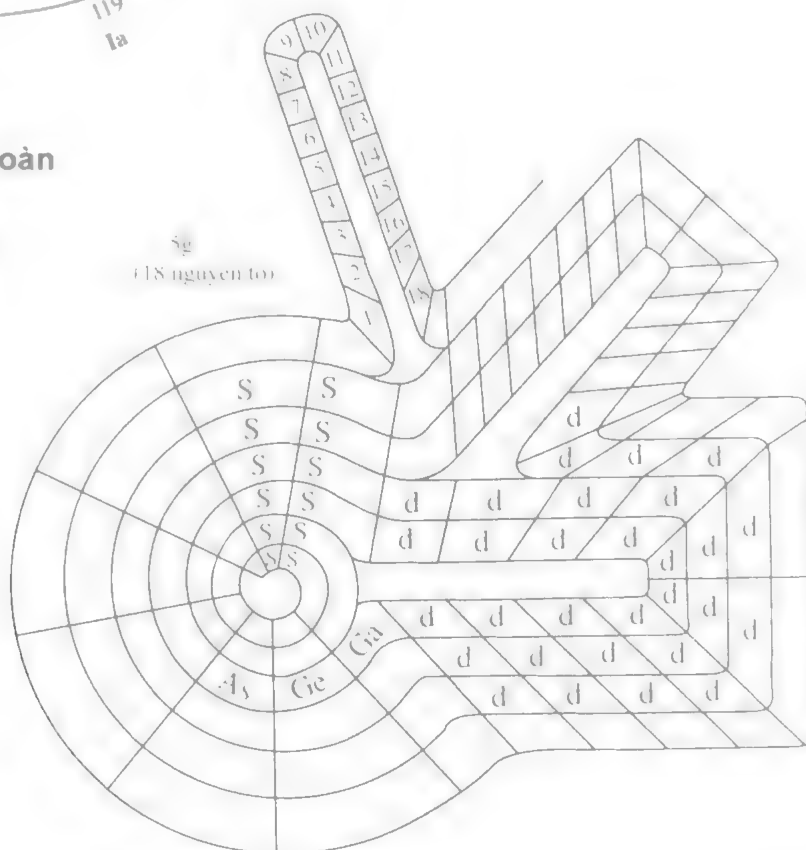
Tất cả các nguyên tố họ s, p, d, f đều được xếp trên vòng xoáy ốc, chỉ thêm một ngạnh gồm 18 ô để xếp các nguyên tố họ 5g.

Cách biểu diễn định luật tuần hoàn theo dạng xoáy ốc, và dạng chìa khoá thể hiện một cách khá đầy đủ và đúng đắn định luật tuần hoàn, nó bao gồm một cách tự nhiên tất cả các họ nguyên tố vào trong một hệ thống.

Tuy nhiên, các dạng này ít được phổ biến vì sử dụng không thuận tiện.

Bảng 5.18. Bảng tuần hoàn dạng chìa khoá (do C.Janet đề nghị)

Bảng 5.19. Bảng tuần hoàn dạng chìa khoá có xét tới phân mức 5g



Bảng 5.20. Bảng tuần hoàn dạng chìa khoá

Nhận xét về các kiểu bảng tuần hoàn

Việc nghiên cứu xây dựng nhiều kiểu bảng tuần hoàn giúp cho việc mở rộng sâu hơn và hiểu sâu hơn nhiều khía cạnh của hiện tượng tuần hoàn.

Nhìn chung, cả sáu dạng bảng kể trên đều có thể sử dụng để biểu diễn định luật tuần hoàn. Mỗi dạng đều có những ưu điểm riêng và những thiếu sót riêng.

Tuy nhiên, nhiều ý kiến cho rằng dạng dài 18 ô là bảng tuần hoàn hoàn hảo nhất (tuy vẫn còn khiếm khuyết). Nó là mẫu mực về tính hệ thống, nó phản ánh một cách sâu sắc mối liên hệ quan trọng nhất giữa các nguyên tố. Toàn bảng lại cân đối, gọn, dễ sử dụng.

Vì vậy, tổ chức IUPAC (International Union of Pure anh Applied Chemistry) khuyên cáo nên sử dụng bảng này trong công việc giảng dạy hoá học và trong các sách báo hoá học.

2. GIỚI HẠN CỦA HỆ THỐNG TUẦN HOÀN

Ngay từ đầu thế kỉ XX, nhà vật lí nguyên tử người Đức Sommerfeld (Xommophen) đã nói: "Không biết giới hạn của hệ thống tuần hoàn, không thể có khái niệm rõ ràng về cấu trúc của nó được".

Ngày nay, giới hạn trên đã rõ (Z = 1, nguyên tố hiđro), nhưng giới hạn dưới còn cần phải bàn luận.

2.1. Giới hạn tự nhiên và giới hạn nhân tạo

Người ta thường nghĩ đến giới hạn tự nhiên và giới hạn nhân tạo của hệ thống tuần hoàn.

Giới hạn tự nhiên ứng với các nguyên tố có điện tích hạt nhân lớn nhất tồn tại trong tự nhiên.

Giới hạn nhân tạo ứng với trị số điện tích hạt nhân giới hạn (Z_{lim}) đạt được bằng phương pháp tổng hợp nhân tạo.

Ngày nay, người ta coi nguyên tố urani ($^{238}_{92}U$) là giới hạn tự nhiên, còn giới hạn nhân tạo là nguyên tố darmstađi có Z = 110 ($_{110}Ds$) mới được IUPAC chính thức công nhận năm 2003.

Tuy nhiên, hai trị số Z đó cũng chưa thể coi là giới hạn cuối cùng.

Nói chung, giới hạn tự nhiên có khuynh hướng chuyển về phía có Z nhỏ. Người ta đã biết rằng từ nguyên tố poloni (Po, Z = 84) trở đi, các nguyên tố đều có tính phóng xạ tự nhiên và đều không bền. Sau một quá trình tự phân huỷ sẽ biến thành nguyên tố bền $_{82}Pb$ hay $_{83}Bi$.

Còn giới hạn nhân tạo?

Ta sẽ xét trong phần dưới đây.

2.2. Các nguyên tố siêu uran

Lí thuyết và thực tiễn đã chứng tỏ rằng không thể tìm thấy các nguyên tố sau uran ($_{92}U$) trong tự nhiên mà chỉ còn hi vọng điều chế bằng con đường nhân tạo.

Tuy nhiên, cho đến trước năm 1940, khoa học chưa thể thực hiện được điều đó.

Nhờ sự phát triển kĩ thuật phản ứng hạt nhân, từ năm 1940 đến nay người ta đã tổng hợp được hơn một chục nguyên tố từ số 93 trở đi, gọi là các nguyên tố siêu uran (đứng sau uran).

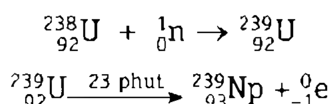
Muốn thực hiện phản ứng hạt nhân, người ta lấy hạt nhân của nguyên tố ban đầu làm "bia" và dùng "đạn" (notron, hạt α, ion của các nguyên tố nhẹ) được gia tốc trong các máy gia tốc mạnh để có năng lượng đủ lớn bắn vào "bia" đó.

Việc biến đổi hạt nhân này sang hạt nhân khác là do sự thay đổi điện tích của chúng. Vì notron không mang điện, cho nên khi lọt được vào "bia" nó sẽ tạo ra một đồng vị mới của nguyên tố ban đầu. Tuy nhiên, đồng vị mới này không bền vì nó chứa số notron lớn hơn cho nên nó phóng ra một electron (gọi là phân huỷ β) và biến thành đồng vị của nguyên tố mới có điện tích hạt nhân lớn hơn một đơn vị.

Nguyên tố 93: neptuni (Np)

Nguyên tố 94: plutoni (Pu)

Năm 1940, hai nhà bác học Mỹ là Mac Milan và Abelson cho bắn phá uran-238 bằng notron thì thu được đồng vị 239 của urani. Đồng vị này không bền, phân huỷ β thì tạo ra một đồng vị của nguyên tố 93.



$$^{238}_{92}U + ^{1}_{0}n \rightarrow ^{239}_{92}U$$

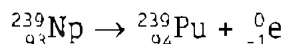
$$^{239}_{92}U \xrightarrow{23\ phut} ^{239}_{93}Np + ^{0}_{-1}e$$

Nguyên tố đầu tiên do con người tạo ra, nằm ngoài giới hạn "hệ thống tự nhiên các nguyên tố hoá học" được gọi là neptuni theo tên hành tinh Neptun (Hải Vương tinh) có quỹ đạo ở ngay sau hành tinh Uranus (Thiên Vương tinh).

Ngày nay, người ta đã biết tới 12 đồng vị của neptuni, có khối lượng nguyên tử từ 231÷241. Tất cả đều phóng xạ.

Đồng vị bền nhất là neptuni-237, có chu kì bán huỷ là $2,2 \times 10^6$ năm. Neptuni không tồn tại trong vỏ Trái Đất vì chu kì bán huỷ của nó nhỏ hơn tuổi Trái Đất chúng ta khoảng hai nghìn lần!

Ngay sau đó, người ta cũng thu được nguyên tố 94 khi đồng vị neptuni-239 phân huỷ β.



$$^{239}_{93}Np \rightarrow ^{239}_{94}Pu + ^{0}_{-1}e$$

Nguyên tố 94 được mang tên plutoni, tên hành tinh cuối cùng của Hệ Mặt Trời là Pluton (sao Diêm Vương[1]). Trong hệ thống tuần hoàn, nguyên tố này đứng sau neptuni, tương tự như Pluton có quỹ đạo ở ngay sau quỹ đạo của Neptun trong Hệ Mặt Trời.

Plutoni-239 là một đồng vị khá bền, phát ra hạt α (phân huỷ α), có chu kì bán huỷ là 24400 năm.

Cho đến nay, *plutoni là đồng vị duy nhất của các nguyên tố siêu uran có ứng dụng thực tế*: cũng như uran-235, plutoni bị phân huỷ dưới tác dụng của các notron và phát ra năng lượng lớn. Do vậy, plutoni được dùng làm nhiên liệu hạt nhân trong các lò phản ứng nguyên tử, làm bom nguyên tử...

---

(1) Hệ Mặt Trời theo tiêu chí mới, chỉ gồm 8 hành tinh lớn truyền thống, Thuỷ tinh, Kim tinh, Trái Đất, Hoả tinh, Mộc tinh, Thổ tinh, Thiên Vương tinh, Hải Vương tinh.

Diêm Vương tinh xếp vào hạng "hành tinh lùn" cùng với Ceres, Charon và 2003 UB313.

Do có ứng dụng quý báu trên, nên plutoni được sản xuất trong các lò phản ứng nguyên tử với số lượng rất lớn. Trong thời gian Đại chiến Thế giới thứ 2 và sau đó, plutoni đã được sản xuất tới hàng triệu kilogam!

Ngày nay, plutoni được nghiên cứu nhiều hơn cả sắt là nguyên tố đã biết từ thuở xa xưa...



Ông là người đầu tiên quan sát được bằng thực nghiệm sự phân rã hạt nhân và chứng minh sự tạo thành phản ứng dây chuyền.

Ông là người đầu tiên chế tạo pin nguyên tử (pin Uranium) tại Chicago năm 1942.

Ông được nhận giải Nobel năm 1938.

Hình 5.1. Enrico Fermi
(1901 - 1954)
nhà vật lí học người Italia

Hình 5.2. Minh hoạ một phản ứng dây chuyền khởi nguồn từ việc bắt một hạt notron

Việc đặt tên berkeli cho nguyên tố 97 là để nhớ tới thành phố Berkeley (Mĩ) là nơi đã khám phá ra nguyên tố này và cũng là để đối xứng với tên tecbi (Tb, Z = 65) nằm trên nó trong dãy lantanit.

Nguyên tố terbi (tecbi) được tìm thấy trong những quặng đất hiếm ở làng Ytterby trên đất Thuỵ Điển.

Cho đến nay, người ta mới điều chế được vài microgam (phần triệu gam) berkeli. Nhưng lượng nhỏ đó cũng đủ để cho các nhà hoá học nghiên cứu chính xác những tính chất hoá học của nó.

Nguyên tố *Californi* được đặt theo tên bang California và tên trường Đại học Tổng hợp California (Mĩ).

Nguyên tố 99, einsteini (Es)

Nguyên tố 100, fermi (Fm)

Tháng 11 năm 1952, Mĩ thử bom khinh khí tại quần đảo Eniwetok (Enivotoc) ở nam Thái Bình Dương. Sau đó cho máy bay B57 lấy mẫu từ những đám khói bụi của vụ nổ và cho tàu thuỷ lấy hơn 2000 tấn "bùn" và san hô đã bị biến dạng tại chỗ xảy ra vụ nổ đem về nghiên cứu tại phòng thí nghiệm phóng xạ Berkeley.

Ở đó, nhóm nghiên cứu đã tìm thấy nguyên tố 99 và đề nghị gọi là athenium và centurium.

Ngày nay, nguyên tố 99 mang tên einsteini (Es) và nguyên tố 100 mang tên fermi (Fm) để tôn vinh hai nhà bác học Einstein và Fermi là những người đã có công trong việc khám phá con đường chinh phục năng lượng nguyên tử.

Einstein đã tìm ra định luật tương đương giữa năng lượng và khối lượng $E = mc^2$ (c là tốc độ ánh sáng) và Fermi đã xây dựng nên lò phản ứng nguyên tử đầu tiên.

Còn có thể điều chế einsteini và fermi bằng cách dùng những ion dương nặng bắn vào hạt nhân neptuni và plutoni:



$$^{237}_{93}Np + ^{12}_{6}C \rightarrow ^{247}_{99}Es + 2(^{1}_{0}n)$$



$$^{239}_{94}Pu + ^{12}_{6}C \rightarrow ^{248}_{100}Fm + 3(^{1}_{0}n)$$

– Nguyên tố 101, mendelevi (Md)

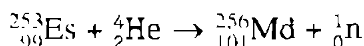
Nguyên tố 101 đã được nhóm Seaborg và các cộng tác viên tìm thấy vào tháng 4 năm 1955.



Hình 5.3. Vụ nổ hạt nhân trên đảo san hô Thái Bình Dương

Năng lượng tàng trữ trong hạt nhân của một số nguyên tử có thể được giải phóng bằng cách phá vỡ những hạt nhân nặng như uranium hoặc bằng cách tổng hợp các hạt nhân nhẹ như đoteri.

Nhóm nghiên cứu lấy khoảng 1tỉ (10^9) nguyên tử einsteini – 253 quét lên một lá vàng rất mỏng một lớp hoàn toàn không nhận ra được rồi cho bắn phá bằng các hạt α có năng lượng cỡ khoảng 48 triệu electron Von (48 MeV) rồi đồng thời làm lạnh bằng nước đá và heli lỏng.



$$^{253}_{99}Es + ^{4}_{2}He \rightarrow ^{256}_{101}Md + ^{1}_{0}n$$

Nhóm Seaborg đặt tên nguyên tố 101 là Mendelevi để: "Thừa nhận công đầu của nhà bác học Nga Đimitri Mendeleep là người đầu tiên đã dùng hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học để tiên đoán tính chất của các nguyên tố còn chưa biết.

Nguyên lí đó là chìa khoá để tìm ra các nguyên tố siêu uran sau này." (Seaborg)

Trong số 1 tỉ nguyên tử einsteini chịu sự bắn phá hàng giờ bởi các hạt α bay nhanh, chỉ có một hoặc hai nguyên tử tham gia phản ứng, nghĩa là chỉ tạo ra được 1 hoặc 2 nguyên tử của nguyên tố mới mà thôi.

Làm sao để chứng tỏ nó là nguyên tố 101 trong khi mỗi ngày chỉ "tóm" được một vài nguyên tử mà nó chỉ tồn tại khoảng 30 phút!

Đối với vật lí, chỉ cần xác định điện tích hạt nhân Z và số khối M nhưng đối với hoá học thì như vậy chưa đủ.

Rất may mắn là trong một thí nghiệm, người ta đã tìm thấy không phải 1 mà là 5 nguyên tử mendelevi. Như thế là đủ để xác lập sự hình thành một nguyên tố mới: ngoài Z và M nói trên, phải xác định vị trí của nó trong hệ thống tuần hoàn; khảo sát những tính chất cơ bản cũng như tính chất phóng xạ của nó (mendelevi phóng xạ α, có chu kì bán huỷ khoảng 30 phút).

Việc tìm ra nguyên tố 101 là một kì công, một đỉnh cao của nghệ thuật thực nghiệm của các nhà khoa học.

Dĩ nhiên là với số nguyên tử điều chế được quá ít ỏi (chỉ vẻn vẹn có 17 nguyên tử) không thể dùng Mendelevi làm "bia" để tổng hợp các nguyên tố tiếp theo.

Nguyên tố 102, nobeli (No)

Như đã thấy ở trên, càng về sau các nguyên tố điều chế được càng ít, lại không bền nên không thể tổng hợp nguyên tố mới theo phương pháp "xây thông thường" nhằm "gắn" từng hạt notron hay hạt α vào hạt nhân của "bia" như đã thực hiện từ trước đến nay.

Bây giờ phải tổng hợp theo phương pháp mới: "đạn" được dùng là từng "tảng" lớn như ion C, N, O, Ne, Ar... để tăng điện tích lên 6, 7, 8, 10... đơn vị, chứ không như những "viên gạch" notron, α... như cũ (phương pháp lắp ghép).

Muốn vậy, phải có máy gia tốc cực mạnh, cỡ hàng trăm triệu electron Von.

Nguyên tố 102 được tìm thấy vào giữa năm 1957 do kết quả làm việc đồng thời của các nhà nghiên cứu tại Mỹ, Anh và Thuỵ Điển trên cơ sở bắn phá curi – 244 bằng những ion cacbon – 13 được gia tốc tới năng lượng rất lớn, cỡ 100 triệu electron von.

Cùng thời gian này, tại phòng thí nghiệm nghiên cứu hạt nhân Dubna (Nga) cũng thu được nguyên tố 102 bằng cách cho bắn phá ion oxi – 16 vào bia plutoni.

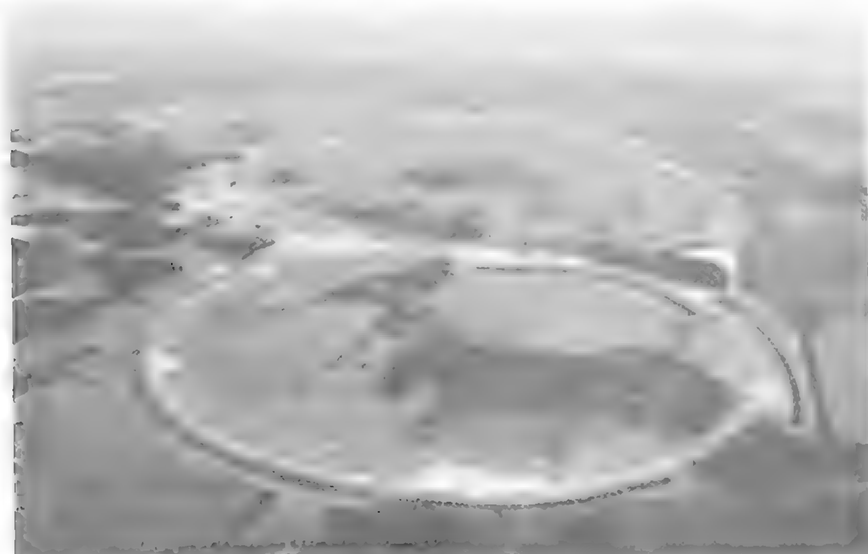


$$^{239}_{94}Pu + ^{16}_{8}O \rightarrow ^{253}_{102}No + 2(^{1}_{0}n)$$

Chu kì bán huỷ của nguyên tố 102 là 3 phút.

Một số nhà vật lí học đề nghị gọi tên nguyên tố 102 là Jolium để tôn vinh nhà bác học Pháp là Juliot Curie, nhưng nhiều nhà khoa học khác lại đề nghị đặt tên là nobeli để tôn vinh nhà hoá học Thuỵ Điển là Nobel.

Hiện nay, nguyên tố 102 chính thức mang tên nobeli (No).



Hình 5.4. Máy gia tốc proton thuộc phòng thí nghiệm Fermi, ở gần Batavia, bang Illinois (Mĩ) có chu vi khoảng 6,5 km, được khánh thành năm 1978. Máy này gia tốc proton tới năng lượng 1 nghìn tỉ electron Von (Ảnh chụp từ trên không).

Người ta cũng đang xây dựng một máy gia tốc khổng lồ ở Waxahachie thuộc bang Texas (Mĩ) có chu vi tới 85 km, đủ bao quanh cả quận Columbia. Với máy này, các nhà khoa học [illegible] nghiên cứu bản chất của hạt nhân khi quan sát những va chạm với năng lượng cỡ 400 nghìn tỉ electron Von.

Nguyên tố 103, lowrenci (lorenxi) (Lw)

Tháng 4 năm 1961, tại phòng thí nghiệm phóng xạ của trường Đại học Tổng hợp California ở Berkeley (Mĩ), các nhà nghiên cứu đã tổng hợp được nguyên tố 103 trên cơ sở bắn phá các nguyên tử californi bằng ion nặng bo – 10 và bo – 11 được gia tốc tới 70 triệu electron Von.



$$^{251}_{98}Cf + ^{11}_{5}B \rightarrow ^{257}_{103}Lw + 5(^{1}_{0}n)$$

Nguyên tố 103 được đặt tên là lawrenci (lorenxi) để tôn vinh nhà bác học Lawrence là người đã sáng lập ra phòng thí nghiệm trên và đã chế tạo ra máy gia tốc xiclotron đầu tiên.

Nguyên tố lowrenci là nguyên tố phóng xạ với chu kì bán huỷ là 8 giây.

Nguyên tố Lw có vai trò đặc biệt quan trọng so với các nguyên tố siêu uran khác bởi vì nó là nguyên tố cuối cùng của họ Actinit gồm 14 nguyên tố họ f.

	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw
d^1	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7	f^7d^1	f^9	f^{10}	f^{11}	f^{12}	f^{13}	f^{14}	$f^{14}d^1$

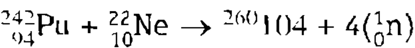
← 14 nguyên tố họ f →

Nguyên tố 104, rutherfordi (rơzofodi) (Rf)

Nhóm IVB
22 Ti
40 Zr
72 Hf
104
d^2

Việc tổng hợp nguyên tố 104 có ý nghĩa lớn đối với việc giải quyết cấu trúc chu kì 7 của hệ thống tuần hoàn vì theo giả thuyết actinit của Seaborg thì nguyên tố 104 phải tương đồng với nguyên tố Hf.

Vào khoảng từ 1969 – 1970 phòng thí nghiệm hạt nhân Dubna (Liên Xô cũ) đã tổng hợp được nguyên tố 104 bằng cách dùng ion neon – 22 bắn vào nhân nguyên tử plutoni (Pu) với năng lượng rất lớn.



$$^{242}_{94}Pu + ^{22}_{10}Ne \rightarrow {}^{260}104 + 4(^1_0n)$$

Cũng vào khoảng thời gian trên, phòng thí nghiệm Berkeley (Mĩ) tổng hợp được nguyên tố 104 bằng cách dùng ion oxi – 16 hoặc ion oxi – 18 bắn phá vào nhân nguyên tử californi với năng lượng cực lớn.

Việc chứng minh sự tồn tại của nguyên tố 104 là rất khó khăn vì chỉ tổng hợp được 150 hạt nhân đồng vị 104 – 260, và lại nó lại rất không bền, chu kì bán huỷ là 0,3 giây.

Phải mất hai năm, các nhà khoa học làm việc tại phòng thí nghiệm Dubna mới chứng tỏ được về mặt hoá học nó tương đồng với nguyên tố hafni, nghĩa là nó thuộc họ d, xếp vào nhóm IVB trong hệ thống tuần hoàn.

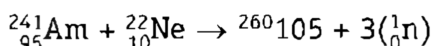
Trong một thời gian dài, nguyên tố 104 mang tên kusatovi (kí hiệu là Ku, theo các nước xã hội chủ nghĩa cũ) và rutherfordi (kí hiệu là Rf, theo các nước phương Tây).

Cho đến tháng 8/1997, IUPAC quyết định gọi là rutherfordi với kí hiệu là Rf.

Nguyên tố 105, dubni (Db)

Vào khoảng thời gian từ 1967 – 1970, phòng thí nghiệm Dubna (Liên Xô cũ) thông báo đã phát hiện ra nguyên tố 105 và nghiên cứu tính chất của nó.

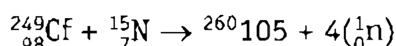
Nguyên tố 105 được tổng hợp bằng cách dùng "đạn" neon bắn phá vào nhân nguyên tử americi.



$$^{241}_{95}Am + ^{22}_{10}Ne \rightarrow {}^{260}105 + 3(^{1}_{0}n)$$

105 là một nguyên tố phóng xạ với chu kì bán huỷ khoảng 2 giây, có tính chất hoá học tương tự tantan, có cấu trúc electron là d^3s^2 và thuộc nhóm VB của hệ thống tuần hoàn.

Năm 1970, phòng thí nghiệm Lawrence (Mĩ) do Anbe Ghiorso đứng đầu thông báo đã tổng hợp được nguyên tố 105 theo phản ứng:



$$^{249}_{98}Cf + ^{15}_{7}N \rightarrow {}^{260}105 + 4(^{1}_{0}n)$$

Nguyên tố 105 có tính phóng xạ với chu kì bán huỷ khoảng 2 giây. Nhóm Ghiorso đề nghị gọi nguyên tố đó là hani để nhớ đến công lao của nhà hoá học phóng xạ Otto Haln (Đức) trong việc nghiên cứu sự phân rã của hạt nhân urani.

Nhóm Dubna không đồng ý với các nhà khoa học Mỹ, khẳng định quyền phát minh của mình và đề nghị đặt tên nguyên tố mới này là nilbori để tôn vinh nhà bác học Đan Mạch Niels Borh.

Đến tháng 8/1997, IUPAC quyết định đặt tên nguyên tố 105 là dubni để ghi nhớ phòng thí nghiệm Dubna (ở nước Nga) nơi đã tổng hợp được một số nguyên tố siêu uran.

Nguyên tố 106, Seaborgi (Sg)

Vào năm 1974, nhóm các nhà vật lí phòng thí nghiệm Lawrence Berkeley Laboratory (LBL) do Albert Ghiorso đứng đầu, dùng máy gia tốc tuyến tính ion nặng tạo ra một đồng vị chứa 106 proton và 157 notron.

Đồng thời, nhóm khoa học ở viện hạt nhân Dubna cũng thông báo phát hiện ra nguyên tố 106 với 106 proton và 154 notron.

Ai là tác giả của nguyên tố mới này? Vấn đề chưa được khẳng định, còn treo lơ lửng!

Vào tháng 9/1993, một nhóm mới ở LBL do Hoffman và Keneth Gregorich lãnh đạo đã dùng máy gia tốc xiclotron bắn phá californi-249 bằng các ion oxi-18 để tạo thành các nguyên tử 106.

Cũng giống như hầu hết các nguyên tố nặng khác, nguyên tố 106 phân rã rất nhanh chóng. Trong suốt một tuần thực nghiệm, nhóm các nhà nghiên cứu chỉ "tóm" được 9 nguyên tử của nguyên tố này và xác định được chu kì bán huỷ của nó là dưới 1 giây!

Đến tháng 10/1993, một uỷ ban đầy thẩm quyền được thành lập từ Liên đoàn Vật lí Lí thuyết và Ứng dụng Quốc tế (IUPAP) và Liên đoàn Hoá học Lí thuyết và Ứng dụng Quốc tế (IUPAC) mới chính thức họp bàn, xem xét kĩ lưỡng và công nhận nhóm Ghiorso.

Còn tên nguyên tố 106?

Từ lúc chào đời (1974) cho đến khi được thừa nhận (1993), "đứa bé 106" đã được 19 tuổi và "cha đẻ" ra nó đề nghị đặt tên là alvarezium để ghi nhớ công lao của Alvarez, người phát minh ra máy gia tốc tuyến tính ion nặng mà nhờ nó, nguyên tố 106 đã ra đời.

Nhưng bốn năm sau, năm 1997, sau khi cân nhắc kĩ, IUPAC đã ra phán quyết gọi nó là Seaborgium (Seaborgi) để ghi nhớ công lao của nhà bác học Mĩ là Seaborg, người lãnh đạo tài ba phòng thí nghiệm Berkeley, đã tổng hợp ra hàng loạt nguyên tố siêu uran (cụ thể là hầu hết các nguyên tố actinit.)

Nguyên tố 107, 108, 109

Cho đến năm 1983, sau nhiều năm làm việc cật lực, nhóm Đức – Nga của nhà vật lí Peter Armbruster ở phòng thí nghiệm hạt nhân Darmstadt (Cộng hoà liên bang Đức) đã tìm thấy các nguyên tố 107, 108, 109 khi bắn phá chì bằng bismut.

+ *Nguyên tố 107 (Bh)* được đề nghị đặt tên là *nielsbohrium (Bh)* để tôn vinh nhà bác học nguyên tử Đan Mạch là Niels Bohr.

+ *Nguyên tố 108 (Hs)* được đề nghị đặt tên là *hassium* để ghi nhớ tỉnh Hess (Cộng hoà liên bang Đức) nơi đặt trung tâm nghiên cứu các nguyên tố siêu nặng.

+ *Nguyên tố 109 (Mt)* được đề nghị đặt tên là *meitnerium* để tôn vinh nhà nữ bác học Đức là Lise Meitner.

Chỉ mới rất gần đây thôi, nhà nữ vật lí phi thường đó mới được nhận một phần nhỏ vinh quang mà bà xứng đáng được hưởng.

Bà Lise Meitner (1878 – 1968) làm việc tại phòng thí nghiệm của nhà hoá học Otto Haln và bà là tác giả chính của công trình tìm ra nguyên tố protactini (Pa, Z = 91) cũng như nhiều chất đồng vị phóng xạ.

Sau khi rời nước Đức để tránh ách đô hộ của chủ nghĩa quốc xã, bà đã cùng nhiều nhà bác học đưa ra cách giải quyết đúng đắn hiện tượng phân rã hạt nhân.

Năm 1944, do việc tìm ra nguyên tố Pa, giải Nobel đã được trao cho Otto Haln, người lãnh đạo phòng thí nghiệm. Trong diễn văn đọc tại buổi lễ nhận giải thưởng, thậm chí Otto Haln cũng không nhắc đến công lao của bà.

Ngày nay, hầu hết các nhà vật lí đều cho rằng giải Nobel đó đáng lẽ phải trao cho bà. Cho nên, mặc dù việc tranh chấp tên các nguyên tố từ 104 – 108 kéo dài nhiều năm nhưng các nhà khoa học đều nhất trí lấy tên bà để đặt cho nguyên tố 109: meitnerium.

Nguyên tố 110, darmstadtium (Ds)

Vào đầu tháng 11/1994, cũng tại phòng thí nghiệm Darmstadt, nhóm các nhà khoa học nói trên đã tổng hợp được hạt nhân của nguyên tử 110 bằng cách dùng

máy gia tốc cực mạnh bắn hàng tỉ tỉ ion niken vào bia chì. Lúc đó là 16 giờ 39 phút ngày 9/11/1994.

Trong một thí nghiệm khác cùng nhóm Armbruster đã tổng hợp được 4 hạt nhân của nguyên tố 110; chúng có đời sống cực ngắn: nửa phần nghìn giây. Các hạt nhân này tự phân rã, phát ra những hạt α và một loạt các hạt ít nặng hơn. Mỗi hạt ban đầu có 110 proton, 159 nơtron và khối lượng là 269 đơn vị.

Việc tìm ra nguyên tố 110 là một sự kiện rất quan trọng, bởi vì theo nhiều nhà vật lí thì nguyên tố 109, phát hiện ra năm 1983 được xem là nguyên tố cuối cùng trong hệ thống tuần hoàn.

Nhà vật lí học Marc Leford đã không ngần ngại viết những dòng sau đây vào năm 1989 trong tạp chí "La Recherche":

"Chắc rằng chúng ta đã đi tới tận cùng con đường và chúng ta đã chứng kiến sự phát hiện cuối cùng của các nguyên tố mới.

Ngày nay, chúng ta có thể khẳng định rằng: hệ thống tuần hoàn sẽ không bao giờ thay đổi nữa".

Quyền tác giả tổng hợp nguyên tố 110 được IUPAC chính thức công nhận vào tháng 8/2003, nguyên tố 110 được gọi là darmstadtium (Ds), mang tên phòng thí nghiệm Darmstadt (CHLB Đức)



Ông là chủ tịch hội hoá học Hoa Kì, giám đốc phòng thí nghiệm Lawrence Berkeley.

Ông đã tổng hợp được nguyên tố plutoni và dưới sự lãnh đạo tài ba của ông, phòng thí nghiệm Berkeley đã tổng hợp được một nửa số nguyên tố siêu uran.

Ông được nhận giải Nobel năm 1951.

Hình 5.5. Glenn Seaborg, 1912 – 1999



Bà Lise Meitner là nhà vật lí học người Đức. Bà là người có công lớn nhất trong việc tìm ra nguyên tố protactini và hàng loạt các nguyên tố phóng xạ.

Do có nhiều cống hiến xuất sắc cho khoa học mà chưa được tôn vinh xứng đáng nên gần đây các nhà khoa học nhất trí đặt tên nguyên tố 109 là meitnerium để tưởng nhớ công lao của Bà.

Hình 5.6. Bà Lise Meitner 1878 – 1968

Nguyên tố 111, (Uuu)

Cũng tại phòng nghiên cứu hạt nhân siêu nặng GSI tại Darmstadt, nhóm các nhà khoa học Đức do Peter Armbruster đứng đầu đã dùng máy gia tốc cực mạnh bắn đồng vị phóng xạ nặng của niken vào bia bitmut.

Ngày 8/12/1994, những cố gắng của họ đa được đền bù xứng đáng: nguyên tố 111 ra đời! Hiệu suất: chỉ một nguyên tử mà thôi với hạt nhân chứa 272 proton và notron (^{272}111).

Và vài ngày sau, trước khi đợt thí nghiệm kết thúc, nhóm nghiên cứu may mắn nhận được thêm 2 hạt nhân của nguyên tố 111 nữa.

Việc phát hiện ra nguyên tố 111 không chỉ bổ sung vào bảng tuần hoàn một thành viên mới mà còn hơn thế nữa. Nó cung cấp thêm một bằng chứng để chứng tỏ hạt nhân có cấu trúc phức tạp hơn là những mô hình truyền thống coi hạt nhân là một tập hợp ngẫu nhiên của proton và notron và theo đó thì nguyên tố càng nặng càng không bền.

Những phương pháp đo cực kì chính xác cho thấy nguyên tố 111 còn bền hơn nguyên tố 110: bốn phần nghìn giây so với nửa phần nghìn giây!

Giả thuyết mới cho rằng proton và notron trong hạt nhân được xếp thành từng lớp và nguyên tố 114 được dự đoán là nguyên tố có lớp proton đầy đủ. Do vậy nguyên tử 111 có lớp proton nhiều hơn nguyên tố 110, gần với lớp proton đầy đủ nên bền hơn.

Nguyên tố 111 chưa được chính thức thừa nhận và theo quy định của IUPAC, nó tạm thời mang tên unununium (Uuu).

Nguyên tố 112, ununbium (Uub)

Ngày 9 – 2 – 1996, lúc 22 giờ 37 phút, tại phòng thí nghiệm GSI tại Darmstadt (CHLB Đức), nhóm nghiên cứu gồm S.Hofmann, V.Ninov, P.Armbruster và nhiều người khác đã tổng hợp được nguyên tố 112 với khối lượng nguyên tử là 277.

Đây là nguyên tố thứ 6 được tổng hợp tại phòng thí nghiệm Darmstadt (5 nguyên tố kia là nguyên tố 107, 108, 109, 110 (đã được IUPAC thừa nhận) và 111, 112 (chưa được thừa nhận).

Nguyên tố ^{283}112 cũng được tạo ra bởi nhóm nghiên cứu Dubna (Nga) khi bắn phá đạn $^{48}_{20}Ca$ vào urani tự nhiên.

Bảng 5.21. Bảng tuần hoàn các nguyên tố hoá học
(cho đến năm 2003)

Sô hiệu nguyên tử — 92
U — Kí hiệu hoá học
Tên nguyên tô — Uran
— Nguyên tử khối trung bình

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H																	2 He helium 4 002 602(2)
3 Li lithium	4 Be beryllium											5 B boron	6 C carbon	7 N nitrogen	8 O oxygen	9 F fluorine	10 Ne neon
11 Na 22 989 770(2)	12 Mg 24 3050(6)											13 Al 26 981 538(2)	14 Si 28 0855(3)	15 P 30 973 761(2)	16 S 32 065(5)	17 Cl 35 453(2	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo molybdenum	43 Tc technetium	44 Ru	45 Rh	46 Pd palladium	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57-71 lanthanoids	72 Hf	73 Ta tantalum	74 W tungsten	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr 223 0197]	88 Ra [226 0254]	89-103 actinoids	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt [268 1388]	110 Ds darmstadtium [271]	111 Uuu							

57 La lanthanum	58 Ce cerium	59 Pr praseodymium	60 Nd neodymium	61 Pm promethium	62 Sm samarium	63 Eu europium	64 Gd gadolinium	65 Tb terbium	66 Dy dysprosium	67 Ho holmium 164 930 32(2)	68 Er erbium	69 Tm thulium 168 934 21(2)	70 Yb ytterbium	71 Lu lutetium
89 Ac actinium	90 Th thorium 232 0381(1)	91 Pa protactinium 231 035 88(2)	92 U uranium 238 028 91(3)	93 Np neptunium	94 Pu plutonium [244 0642]	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium [257 0951]	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium

Không giống nguyên tố 110, chu kì bán huỷ của nguyên tố 112 rất nhỏ (280 phần triệu giây) vì vậy rất khó nghiên cứu.

Cũng như nguyên tố 111, cho đến nay nguyên tố 112 vẫn chưa được IUPAC chính thức thừa nhận nên theo quy định chung vẫn tạm thời mang tên ununbium (Uub).

Giới hạn dưới về đời sống của các nguyên tử

Về việc tổng hợp các nguyên tố, người ta rất chú ý đến thời gian sống tối thiểu của hệ hạt nhân và electron để có thể coi hệ đó là nguyên tử của nguyên tố hoá học. Nguyên tố hoá học gồm các nguyên tử ở trạng thái ổn định nghĩa là những hệ gồm hạt nhân nguyên tử và electron.

Việc tổng hợp một nguyên tố bao gồm hai giai đoạn:

– Sự tạo thành hạt nhân nguyên tử.

– Hạt nhân mới tạo thành giải phóng năng lượng kích thích bằng cách phát ra một vài nơtron hay phát ra tia γ. Thời gian đó vào khoảng 10^{-17} – 10^{-16} giây.

Sau đó xảy ra quá trình nhận electron, hình thành lớp vỏ để tạo ra nguyen tố hoá học. Thời gian đó vào khoảng 10^{-8} – 10^{-9} giây.

Tổng số thời gian đó là "giới hạn dưới" về đời sống của nguyên tử.

Nếu thời gian nhỏ hơn tổng số trên thì hạt nhân không đủ thì giờ để "bắt" electron, khi đó không thể nói là đã tổng hợp được nguyên tố mới.

Theo điều vừa trình bày trên thì nguyên tố 112, tuy có đời sống rất ngắn ngủi nhưng vẫn chưa tới giới hạn dưới về đời sống tối thiểu của các nguyên tử.

2.3. Nguyên tố 114 và các nguyên tố tiếp theo

2.3.1. Hệ thống tuần hoàn các hạt nhân nguyên tử

Trong tự nhiên có hơn 300 hạt nhân bền và hạt nhân phóng xạ. Kể từ khi tổng hợp được các nguyên tố phóng xạ mới đến nay, các nhà khoa học đã tạo ra được hơn 1600 hạt nhân phóng xạ của tất cả các nguyên tố.

Như vậy người ta đã biết hơn 1900 hạt nhân nguyên tử.

Việc nghiên cứu có tính hệ thống tính chất một số rất lớn các đồng vị tự nhiên và nhân tạo đã đưa đến những kết luận quan trọng sau đây:

a) Trong hạt nhân nguyên tử cũng có những mức năng lượng tương tự như mức năng lượng ở các lớp và phân lớp electron trong nguyên tử.

b) Trong hạt nhân có những *lớp* proton và nơtron (mô hình hạt nhân có lớp).

c) Trong cấu tạo hạt nhân nguyên tử cũng có những *chu kì* như chu kì trong cấu tạo các electron trong vỏ nguyên tử.

Nếu trong vỏ nguyên tử, các lớp electron ngoài cùng trở nên đặc biệt bền vững khi điện tích hạt nhân bằng:

2(He), 10(Ne), 18(Ar), 36(Kr), 54(Xe), 86(Rn).

thì trong hạt nhân, các lớp nơtron và proton cũng trở nên bền vững nhất khi trong hạt nhân có số nuclon (proton hoặc nơtron) bằng 2, 8, 20, 50, 82 và 126.

Những con số kì lạ này (cũng được gọi là số kì diệu) xác định độ bền của hạt nhân nguyên tử.

Ví dụ:

Nguyên tố	Số proton	Số nơtron
${}^{4}_{2}He$	2	2
${}^{16}_{8}O$	8	8
${}^{40}_{20}Ca$	20	20
${}^{208}_{82}Pb$	82	126

Tất cả bốn chuỗi phân rã phóng xạ của ${}^{238}_{92}U$, ${}^{235}_{92}U$, ${}^{232}_{90}Th$, ${}^{231}_{93}Np$ đều kết thúc bằng các hạt nhân kì diệu: ${}^{208}_{82}Pb$, ${}^{209}_{83}Bi$.

d) Các chu kì trong hệ thống hạt nhân nguyên tử kết thúc bằng các hạt nhân bền vững tương tự các chu kì trong hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học kết thúc ở nguyên tử khí trơ.

e) Hiện tượng tuần hoàn không những thể hiện ở lớp vỏ eletron của nguyên tử mà còn thể hiện cả ở hạt nhân nguyên tử (chẳng hạn độ phóng xạ, năng lượng liên kết, độ hao hụt khối lượng hạt nhân...)

Tính chất phức tạp của việc xây dựng hệ thống tuần hoàn các hạt nhân nguyên tử là ở chỗ, nó phải bao gồm hơn 1900 đồng vị, trong khi đó hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học chỉ bao gồm hơn 100 (cho đến nay chính thức là 110) nguyên tố (hay dạng nguyên tử).

Đã có một số tác giả đề xuất một số kiểu bảng tuần hoàn các hạt nhân nguyên tử nhưng nói chung đều chưa rõ ràng, khó hiểu nên chưa được phổ biến rộng rãi.

2.3.2. Lí thuyết "đảo bền"

Từ đầu thế kỉ XX, nhà hoá lí Svine người Latvia nhận thấy rằng trong số các nguyên tố phóng xạ tự nhiên thì các *nguyên tố nặng nhất* (thori và urani) lại chính là các nguyên tố *có thời gian sống dài nhất.*

$$\tau_{\frac{1}{2}}({}^{235}_{92}U) = 7,1 \times 10^{8} \text{ năm},$$

$$\tau_{\frac{1}{2}}({}^{232}_{90}Th) = 1,4 \times 10^{10} \text{ năm}$$

Sau khi nghiên cứu tỉ mỉ những tính chất của các đồng vị phóng xạ, ông đi tới kết luận:

Sau nhiều đồng vị có thời gian sống ngắn, xuất hiện *"đảo"* các *đồng vị có thời gian sống dài*. Thori và urani nằm trên một trong số các đảo đó.

Theo các tính toán của ông, có thể tìm thấy các đảo tiếp theo ở các nguyên tố chưa biết với số thứ tự trong khoảng từ 108 ÷ 110.

Svine bắt đầu tìm các nguyên tố này trong tự nhiên. Ông nghiên cứu bụi có nguồn gốc vũ trụ mà nhà thám hiểm vùng Bắc cực Nordeusheld thực hiện được trên các băng hà đảo Groeland. Năm 1925, Svine thông báo: trong phổ rơnghen của bụi, ông phát hiện thấy những vạch có lẽ thuộc về nguyên tố có số thứ tự 108! Lúc bấy giờ Svine là một nhà khoa học chưa có tiếng tăm nên chẳng có ai để ý đến công trình nghiên cứu của ông. Mãi đến khoảng giữa những năm 60 của thế kỉ trước mới thấy xuất hiện trở lại giả thuyết về đảo bền tương đối của các nguyên tố có số thứ tự rất lớn.

Các nhà khoa học quyết định mở rộng mô hình hạt nhân có lớp vào khu vực có giá trị Z lớn. Nhờ các tính toán trên máy tính mạnh, họ đã đi tới những kết luận sau:

Các số proton 114 và 126 cũng như số nơtron bằng 184 là những số kì diệu.

Có những hạt nhân hai lần kì diệu như:

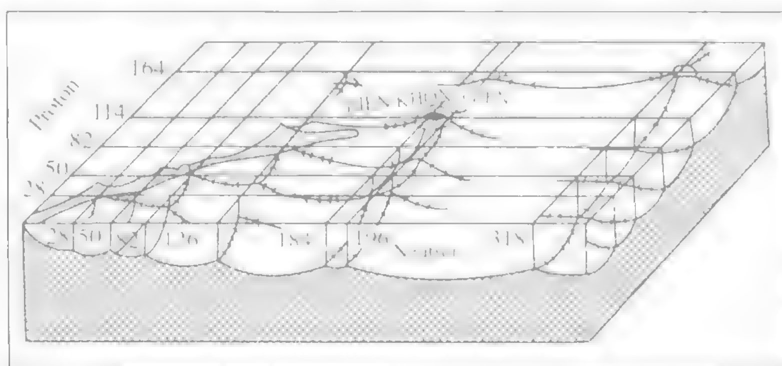
$$^{298}114\ (Z = 114,\ N = 184);$$

$$^{310}126\ (Z = 126,\ N = 184)$$

Theo các kết quả tính toán thì các hạt nhân đó phải nằm trên đảo bền.

Như vậy là: *Trong đại dương những hạt nhân không bền, nổi lên những "hòn đảo" bền.*

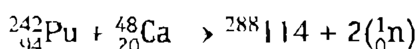
Hạt nhân của các nguyên tố 114 và 126 có thể tồn tại trong tự nhiên.



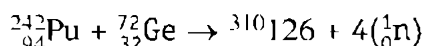
Hình 5.7. Cách mô tả bằng hình tượng "đảo bền" và "biển không bền" do G.Seaborg đề xuất

Cũng có khả năng tổng hợp hạt nhân có Z = 114 với số nơtron hơn kém 184 (N = 174÷194) với số khối của những hạt nhân này có giá trị từ 288 – 308.

Có thể thực hiện việc tổng hợp bằng các phản ứng hạt nhân sau:



$$^{242}_{94}Pu + ^{48}_{20}Ca \rightarrow ^{288}114 + 2(^{1}_{0}n)$$



$$^{242}_{94}Pu + ^{72}_{32}Ge \rightarrow ^{310}126 + 4(^{1}_{0}n)$$

Giả thuyết hạt nhân của nguyên tử 114 và những nguyên tử lân cận trong hệ thống tuần hoàn nằm trên đảo bền bước đầu được xác nhận bởi những công trình nghiên cứu về các tia vũ trụ.

Các giáo sư người Anh là Powell và Fowler nghiên cứu ảnh các tia vũ trụ chụp trên độ cao 40 km đã phát hiện ra hạt nhân có điện tích khoảng 108.

Không loại trừ khả năng đó là dấu vết của các đồng vị của nguyên tố 114 bị phân rã. Bởi vì các tia vũ trụ qua hàng triệu năm mới tới Trái Đất, cho nên có thể nói nó đã bị phân huỷ trên hành trình của nó.

Dĩ nhiên là có thể đặt vấn đề về khả năng "tiếp đất" của các hạt nhân đó trên bề mặt hành tinh chúng ta.

Theo tính toán thì hạt nhân của nguyên tố 114 rơi trên mỗi km^2 bề mặt Trái Đất mỗi năm ... một hạt! Như vậy trong một năm, trên toàn bề mặt Trái Đất chỉ có 20 microgam nguyên tố 114 rơi xuống. Liệu có thể "gom" lại một lượng nguyên tố quá nhỏ bé đó không?

Con đường duy nhất để có được nguyên tố đó là con đường tổng hợp nhân tạo.

2.3.3. Nguyên tố 114 và các nguyên tố tiếp theo

Đầu năm 1999, sau một mẻ thí nghiệm kéo dài 40 ngày đêm, phòng thí nghiệm Dubna (Nga) tuyên bố đã "bắt" được nguyên tử 114 sống lâu tới 30 giây khi bắn phá hàng tỉ tỉ lần ion canxi ($^{48}_{20}Ca$) vào bia plutoni ($^{244}_{94}Pu$).

Mấy tháng sau, nhóm Berkeley (Mĩ) thông báo đã tìm thấy cặp nguyên tử 114 và 118 trong thí nghiệm bắn hàng triệu triệu ion kripton lên bia chì.

Trong xu hướng chung là thời gian sống của các nguyên tố siêu nặng cứ giảm dần xuống cỡ phần triệu giây (như đối với nguyên tố 112) thì lại xuất hiện nguyên tố 114[1] sống lâu tới 30 giây!

Liệu việc phát hiện ra nguyên tố 114 có thể coi như là các nhà khoa học đã đặt chân lên thềm của "hòn đảo bền" của các nguyên tố hay chưa?

Vẫn còn ở phía trước câu hỏi lớn:

Hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học sẽ kết thúc ở đâu?

(1) Nguyên tố 114 chưa được chính thức công nhận và theo quy định của IUPAC nó tạm thời mang tên ununquadrium (Uuq).

2.4. Hệ thống tuần hoàn bao gồm cả chu kì 8 và chu kì 9

Dựa vào những điều trình bày ở trên, một số nhà khoa học như Seaborg, Taube, Goldauski đã đề nghị một hệ thống tuần hoàn bao gồm thêm chu kì 8 và chu kì 9 (giả định).

Chu kì 8 cũng như chu kì 9 đều gồm 50 nguyên tố. So với chu kì 6 và 7 thì nhiều hơn 18 nguyên tố.

Chu kì 8 bắt đầu từ nguyên tố có số thứ tự là 119 (tạm gọi là Ekafranxi) và kết thúc với nguyên tố 168 (tạm thời gọi là Điviradon), nguyên tố này có bản chất hóa học tương tự như các khí trơ.

Chu kì 9 bắt đầu từ nguyên tố có số thứ tự là 169 (tạm gọi là Đivifranxi) và nguyên tố cuối cùng có số thứ tự là 218 (tạm gọi là Triradon).

Trong hai chu kì trên sẽ xuất hiện một họ nguyên tố mới: các nguyên tố họ g (họ 5g và 6g) gồm 18 nguyên tố.

Họ g ứng với l = 4. Số nguyên tố tối đa ứng với phân lớp l = 4 bằng :

$$S = 2(2l + 1) = 2[(2 \times 4) + 1] = 18.$$

Từ trước đến nay ta chỉ mới biết bốn họ nguyên tố: họ s, p, d và f.

Bảng 5.23. Bảng tuần hoàn gồm cả chu kì 8 và chu kì 9

Chu kì	s	s	d	f	g	f	d	p
1	H 1	He 2						
2	Li 3	Be 4						B ... Ne 5 ... 10
3	Na 11	Mg 12						Al ... Ar 13 ... 18
4	K 19	Ca 20	Sc 21				Ti ... Zn 22 ... 30	Ga ... Kr 31 ... 36
5	Rb 37	Sr 38	Y 39				Zr ... Cd 40 ... 48	In ... Xe 49 ... 54
6	Cs 55	Ba 56	La 57	Ce 58		Pr ... Lu 59 ... 71	Hf ... Hg 72 ... 80	Tl ... Rn 81 ... 86
7	Fr 87	Ra 88	Ac 89	Th 90		Pa ... Lr 91 ... 103	Ku 104 ... 112	113 ... 118
8	119	120	121	122	123 ... 140	141 ... 153	154 ... 162	163 ... 168
9	169	170	171	172	173 ... 190	191 ... 203	204 ... 212	213 ... 218

CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP

Các kiểu bảng tuần hoàn

5.1. Vì sao người ta lại đề xuất nhiều kiểu bảng tuần hoàn? Có lợi ích gì?

5.2. Có bao nhiêu dạng chủ yếu? Nêu ưu điểm, nhược điểm của mỗi dạng.

5.3. Qua kinh nghiệm bản thân, anh (chị) thấy kiểu bảng nào thích hợp nhất đối với việc giảng dạy (và học tập) môn hoá học ở nhà trường? Vì sao?

Giới hạn của bảng tuần hoàn

5.4. a) Chu kì 7 hiện nay chưa đầy đủ. Nếu đầy đủ, số nguyên tố sẽ là bao nhiêu? Vì sao?

b) Số hiệu nguyên tử của nguyên tố kim loại kiềm thổ thuộc chu kì 8 (hiện nay chưa tìm ra) sẽ là bao nhiêu?

5.5. Nguyên tố 109 được tìm ra vào năm 1982 tại phòng thí nghiệm hạt nhân Darmstadt (Cộng hoà liên bang Đức) và được đặt tên là Meitnerium.

a) Thử viết cấu hình electron của nguyên tố đó.

b) Xác định vị trí của nó trong hệ thống tuần hoàn.

c) Kể tên nguyên tố cùng nhóm với nguyên tố 109. Nguyên tố này có tính chất hoá học giống nguyên tố nào nhất?

5.6. Giả định rằng nguyên tố 113 mới được phát hiện và mang kí hiệu Et.

a) Thử viết cấu hình electron của nguyên tố đó.

b) Dự đoán tên các nguyên tố cùng nhóm với Et.

c) Viết công thức hợp chất của Et với oxi và clo.

5.7. Trong nhóm IVA, cacbon (phi kim) và silic (phi kim) có nhiệt độ nóng chảy rất cao (lần lượt là 4100^{0}C và 1420^{0}C); trong khi đó thì thiếc và chì lại có nhiệt độ nóng chảy tương đối thấp (232^{0}C và 327^{0}C).

Dự đoán cấu hình electron và những tính chất vật lí và hoá học cơ bản của nguyên tố nhóm IVA thuộc chu kì 7 (còn chưa tìm ra).

5.8. Hãy dự đoán xem nguyên tố 116 (hiện chưa tìm ra) thuộc chu kì nào? Cấu hình electron của nó? Nó là kim loại hay phi kim?

5.9. Các nhà khoa học dự đoán có khả năng tồn tại những nguyên tố siêu nặng tương đối bền (nhưng chưa tìm ra).

Năm 1975, người ta đã sai lầm khi tin rằng đã tìm ra nguyên tố 126 trong một mảnh mica.

Thử dự đoán xem electron thuộc phân lớp có mức năng lượng cao nhất của nguyên tố đó có số lượng tử n và l là bao nhiêu? Kí hiệu của phân lớp đó? Phân lớp này có bao nhiêu obitan?

PHẦN SÁU

NGUỒN GỐC CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC
CÁCH ĐẶT TÊN CÁC NGUYÊN TỐ

"Ta có thể ẩn tàng trong hạt dẻ,

Vẫn coi mình là vua của vũ trụ vô biên..."

(Hamlet) Shakespear

Vũ trụ bắt đầu từ khi nào?

Các nguyên tố hoá học từ đâu ra?

Mỗi nền văn minh đều sáng tạo ra những huyền thoại khác nhau để lí giải vấn đề đó. Chẳng hạn Kinh Cựu ước viết: Chúa sáng tạo ra thế giới vào 5000 năm trước công nguyên...

Còn các nguyên tố hoá học?

Cho đến gần cuối thế kỷ XIX, việc đặt câu hỏi về nguồn gốc tạo thành các nguyên tố hoá học vẫn còn là điều vô nghĩa. Hoá học thế kỉ XIX coi các nguyên tố là vĩnh cửu và bất biến. Ý kiến ngự trị hồi đó cho rằng trong vũ trụ vốn sẵn có những tiểu phần sơ cấp của vật chất: đó là những nguyên tử bất biến, không chuyển hoá lẫn nhau và mang thuộc tính của tất cả các nguyên tố.

Những thành tựu của vật lí học thế kỉ XX về cấu tạo nguyên tử và sau đó là việc thực hiện các phản ứng hạt nhân, việc điều chế những đồng vị phóng xạ nhân tạo, việc tổng hợp hàng loạt các nguyên tố không tìm thấy trên quả đất... mở ra con đường giải quyết về mặt lí thuyết và thực tiễn vấn đề trên.

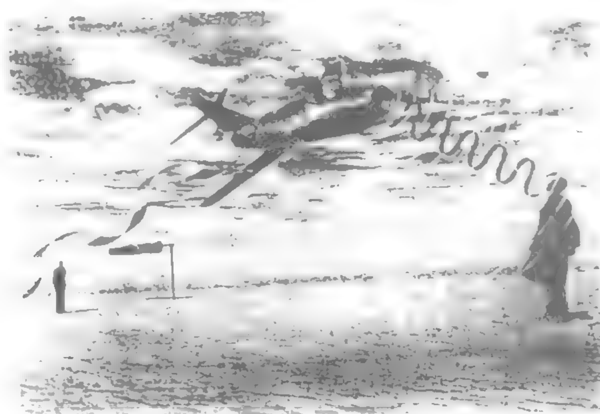
Chính vật lí học thiên văn, một ngành khoa học trẻ tuổi đã đóng một vai trò lớn lao trong việc trả lời câu hỏi "Các nguyên tố hoá học được tạo thành trong thiên nhiên từ khi nào và ở đâu?".

Cho đến nay, lí thuyết được hầu hết các nhà khoa học chấp nhận là các nguyên tố hoá học được tạo thành sau vụ nổ lớn "Big Bang".

1. NGUỒN GỐC CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC

1.1. Vụ nổ lớn Big Bang

1.1.1. Hiệu ứng Doppler (Doppler, 1803 – 1853, nhà vật lí học người Áo)



– Khi máy bay lại gần người quan sát (bên phải hình 6.1), bước sóng âm do động cơ phát ra ngắn đi (tần số tăng lên) làm âm độ cao lên.

– Khi máy bay bay xa người quan sát (bên trái hình 6.1) bước sóng âm dài ra (tần số giảm) làm âm độ giảm dần.

Hình 6.1. Hiệu ứng Doppler

Quan hệ giữa vận tốc và bước sóng, tức hiệu ứng Doppler, rất thường gặp. Ví dụ, khi máy bay bay tới gần ta thì tiếng động cơ nghe cao hơn, còn khi đã bay qua đầu ta thì tiếng động cơ nghe thấp dần rồi tắt luôn. Âm độ cao hơn tương ứng với sóng âm có bước sóng[1] ngắn hơn và tần số[2] cao hơn. Sở dĩ như vậy là vì khi máy bay bay về phía ta, nó sẽ ở gần ta hơn mỗi khi phát ra đỉnh sóng tiếp theo, làm giảm khoảng cách giữa hai đỉnh sóng (bước sóng ngắn đi, do đó tần số sẽ tăng lên).

Tương tự, khi máy bay bay xa dần ta thì các bước sóng dài ra (do đó tần số giảm đi) nên âm độ ta nghe được thấp hơn.

Hiệu ứng Doppler càng đúng với ánh sáng. Nếu một thiên hà giữ khoảng cách không đổi với Trái Đất thì những vạch đặc trưng trong quang phổ xuất hiện ở vị trí bình thường hoặc vị trí chuẩn. Tuy nhiên, nếu thiên hà di chuyển ra xa chúng ta thì sóng sẽ bị kéo dài ra (giãn ra) và các vạch đặc trưng bị dịch chuyển về phía đỏ (các bước sóng lớn). Còn nếu thiên hà di chuyển về phía chúng ta, thì sóng bị nén lại và các vạch đặc trưng sẽ bị dịch chuyển về phía xanh (có bước sóng nhỏ).

1.1.2. Vũ trụ giãn nở

Năm 1923, nhà thiên văn học người Mĩ là Edwin Hubler[3] với kính viễn vọng mạnh đã phát hiện ra nhiều vệt mờ sáng gọi là các tinh vân, thực tế là những thiên hà khác, một tập hợp rất nhiều ngôi sao giống như Mặt Trời của chúng ta nhưng ở rất xa.

Nhưng điều thứ hai mà Hubler phát hiện còn đáng lưu ý hơn nhiều.

---

(1) Bước sóng là khoảng cách giữa hai đỉnh sóng.

(2) Tần số sóng là số sóng trong một giây.

(3) Edwin Hubler (1889 –1953).

Các nhà thiên văn biết rằng: dựa vào hiệu ứng Doppler, khi phân tích ánh sáng đến từ các thiên hà khác, có thể biết được chúng đang di chuyển về phía chúng ta hay di chuyển ra xa chúng ta.

Điều làm cho họ ngạc nhiên là hầu hết chúng đều di chuyển ra xa chúng ta. Năm 1925, ghi nhận được 43 lần dịch chuyển sang đỏ (ra xa chúng ta) và hai lần dịch chuyển sang xanh (lại gần ta). Hơn nữa, càng xa chúng di chuyển càng nhanh hơn.

Năm 1929, Hubler công bố phát hiện trên như sau:

Dù nằm ở đâu thì những thiên hà xa cũng đang chuyển động rất nhanh ra xa chúng ta. Trong phạm vi rộng, mọi thiên hà đều dịch chuyển ra xa các thiên hà khác. Nói một cách khác: *Vũ trụ đang nở ra.*

Sự phát hiện ra vũ trụ giãn nở là một trong những cuộc cách mạng trí tuệ lớn của thế kỉ XX. Nó xuất hiện hết sức bất ngờ và làm thay đổi hoàn toàn quan niệm về nguồn gốc vũ trụ.

1.1.3. Vụ nổ lớn Big Bang

Nếu các thiên hà đang di chuyển ra xa chúng ta thì tức là trong quá khứ, chúng đã ở gần nhau hơn.

Từ tốc độ giãn nở hiện nay (đã xác định được), có thể ước đo rằng cách đây từ 10 tỉ đến 15 tỉ năm, tại một thời điểm, tất cả chúng đều chính xác ở cùng một điểm, tại đó vũ trụ vô cùng nhỏ với mật độ vô hạn, nhiệt độ vô hạn...

Nếu hình dung vũ trụ lúc ấy là một quả cầu(1) thì:

- Đường kính của nó: d = 10^{-28}cm (đường kính của proton là 10^{-13}cm).

- Tỉ khối của nó: $\rho = 10^{96}$ g/cm^3 (tỉ khối của hạt nhân nguyên tử là 10^{14} g/cm^3 tức là 100 triệu tấn/cm^3).

- Nhiệt độ là 10^{32}K (nhiệt độ khi nổ bom khinh khí là 10^{10}K).

Tại thời điểm nói trên đã xảy ra một vụ nổ lớn được gọi là "Vụ nổ lớn Big Bang" (Big Bang theo tiếng Anh có nghĩa là vụ nổ lớn).

Những vật chất chứa trong quả cầu ("hạt dẻ") là một hỗn hợp gồm electron, positron (hay electron dương), proton, notron và những hạt hầu như không có khối lượng như notrinô, antinotrinô và photon bị bắn ra khoảng trống không của vũ trụ.

Bức tranh về giai đoạn đầu đậm đặc và nóng bỏng này của vũ trụ được nhà khoa học George Gamov (Gamốp) giới thiệu năm 1948 trong một bài báo.

Bài báo đo đưa ra một tiên đoán đáng chú ý là bức xạ giai đoạn đầu hết sức nóng đó vẫn phải còn khắp quanh ta ngày nay.

(1) Stephen William Hawking, người Anh (là nhà vật lí lí thuyết lỗi lạc nhất sau Einstein) đã gọi một cach hình ảnh quả cầu đó là "hat dẻ" trong cuốn sách của ông mang tên " Vũ tru trong một hat dẻ".

Năm 1965, tiên đoán trên đã được xác nhận khi các nhà vật lí Arno Penzias (Acnô Penziat) và Robert Wilson (Robot Uynson) quan sát thấy bức xạ nền vi sóng của vũ trụ (tức là bức xạ điện từ sinh ra từ thời hồng hoang của vũ trụ).

Ngày nay, các nhà thiên văn coi thời điểm xảy ra vụ nổ lớn Big Bang là điểm khởi đầu của thời gian và tuổi của vũ trụ vào khoảng 13,7 tỉ năm[(1)].

1.2. Sự tạo thành các nguyên tố hoá học

Khoảng một giây sau vụ nổ lớn Big Bang, vũ trụ là một hỗn hợp gồm nhiều photon, electron, notrino và những phản hạt của chúng cùng một số proton và notron.

Khoảng mấy phút sau, do sự giãn nở, vũ trụ nguội dần, nó trở thành một lò phản ứng nhiệt hạch khổng lồ : proton và notron kết hợp với nhau để trở thành những hạt nhân nguyên tử đầu tiên ^{2}H, ^{3}He và ^{4}He.

Sau khoảng mười phút, hơn 25% khối lượng của vũ trụ tồn tại dưới dạng heli ^{4}He, còn 1/1000 dưới dạng đoteri ^{2}H.

Khoảng một trăm triệu năm sau, lực hấp dẫn hút các hỗn hợp vũ trụ để trở thành những ngôi sao nguyên thuỷ.

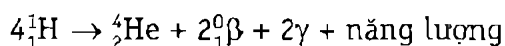
Hàng trăm nghìn năm sau, khi nhiệt độ hạ xuống còn vài nghìn độ, các electron chuyển động chậm đến mức hạt nhân nhẹ có thể bắt giữ chúng để tạo thành các nguyên tử.

Sự phân tích quang phổ của Mặt Trời, của các ngôi sao khác gần giải ngân hà, bụi vũ trụ và sự phân tích hoá học về Trái Đất, Mặt Trăng, các thiên thạch và các tia vũ trụ đã cung cấp những dữ kiện về lượng các đồng vị và từ đó đưa ra lí thuyết về nguồn gốc của các nguyên tố trên các ngôi sao.

Quá trình tạo thành các nguyên tố xảy ra qua nhiều giai đoạn trong quá trình tiến hoá của các vì sao; trong đó có các giai đoạn chủ yếu sau:

1.2.1. Sự kết hợp các hạt nhân hiđro tạo thành heli

Dưới tác động của lực hút trọng trường, các ngôi sao nguyên thuỷ co lại làm nhiệt độ tăng lên tới khoảng 10 triệu độ – nhiệt độ tới hạn cho phản ứng nhiệt hạch của hiđro để tạo thành heli



$$4\,^{1}_{1}H \rightarrow \,^{4}_{2}He + 2\,^{0}_{1}\beta + 2\gamma + \text{năng lượng}$$

Quá trình trên gọi là *"sự đốt cháy hiđro"*.

(1) Giải Nobel về vật lí năm 2006 đã được trao cho hai nhà khoa học người Mĩ là Tiến sĩ C. Mather (làm việc tại NASA – tức là cơ quan Hàng không vũ trụ Mĩ) và Giáo sư S.Smoot (trường đại học California - Berkeley).

Dựa trên những dữ kiện chính xác thu thập được từ vệ tinh COBE, phóng lên từ năm 1989, hai nhà vật lí thiên văn Mĩ đã minh chứng cho giả thuyết về lịch sử và cơ cấu tạo thành vũ trụ của các nhà nghiên cứu vũ trụ trước đó.

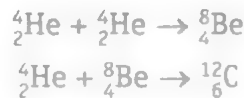
Công trình của hai ông đã góp phần làm vững chắc thêm thuyết Vụ nổ lớn Big Bang về nguồn gốc của vũ trụ.

1.2.2. Sự kết hợp các hạt nhân heli để tạo thành các nguyên tố nặng hơn như C, O, Ne, Mg (gọi là "sự đốt cháy heli")

Sau nhiều tỉ năm, khoảng 10% hiđro (^{1}H) bị đốt cháy và các ngôi sao co lại hơn nữa. Các hạt nhân ^{4}He tạo thành một lớp vỏ dày đặc, nóng tới 2×10^{8}K (200 triệu độ). Ở nhiệt độ này heli (^{4}He) tiếp tục bị đốt cháy.

Năng lượng toả ra trong quá trình đốt cháy heli làm giãn nở lượng hiđro (^{1}H) còn lại thành một lớp rộng bao la: ngôi sao trở thành "sao khổng lồ đỏ", có đường kính lớn gấp 100 lần đường kính ban đầu.

Trong lõi ngôi sao, từng cặp hạt nhân heli (^{4}He) - các phân tử α - kết hợp lại thành ^{8}Be($\tau_{1/2} = 2 \times 10^{-16}$sec); ^{8}Be lại kết hợp với heli thứ ba (^{4}He) để tạo thành cacbon (^{12}C) bền:

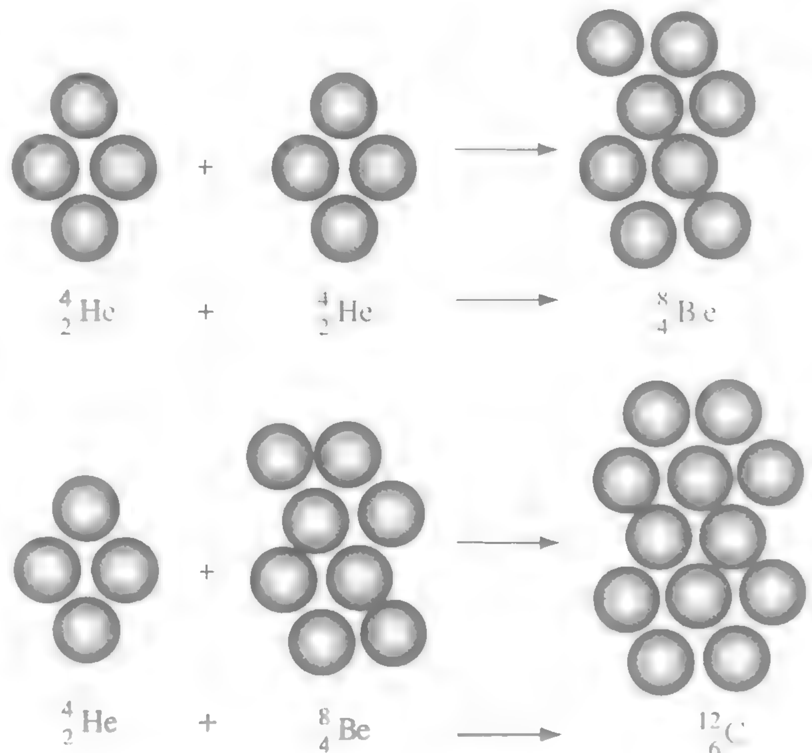


Sự tạo thành cacbon ($_{6}C$) trực tiếp từ heli ($_{2}He$) có nghĩa là quá trình đó đã bỏ qua các hạt nhân $_{3}Li$, $_{4}Be$, $_{5}B$ và điều đó đã giải thích tại sao các nguyên tố Li, Be, B lại không có nhiều trong tự nhiên. Các nguyên tố đó được tạo nên do con đường gia tốc điện tử nguội (những hiện tượng trên bề mặt các ngôi sao gây ra những từ trường mạnh có tác dụng gia tốc hạt).

Sau khi tạo thành hạt nhân ^{12}C, lại tiếp tục diễn ra sự kết hợp với các hạt α (hạt nhân He) để tạo thành các hạt nhân nặng hơn: O, Ne... tới Mg.



Vì heli là một nguyên tố có số khối chẵn nên ta có thể hiểu tại sao các nguyên tố có số khối chẵn lại có mặt trong vũ trụ nhiều hơn các nguyên tố có số khối lẻ.

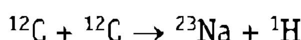


Hình 6.2. Sự tạo thành hạt nhân $^{12}_{6}C$ từ các hạt nhân $^{4}_{2}He$

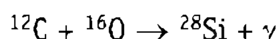
Ở nhiệt độ cỡ 100 triệu độ bách phân, các hạt nhân $^{4}_{2}He$ kết hợp với nhau để tạo nên hạt nhân $^{12}_{6}C$ (qua trung gian là đồng vị $^{8}_{4}Be$ không bền).

1.2.3. Sự tạo thành các nguyên tố từ Fe tới Ni

Trong khoảng 10 triệu năm, ^{4}He đã bị tiêu thụ hết, các hạt nhân nặng hơn tạo thành một lớp vỏ, lớp này co lại làm nhiệt độ tăng lên tới 700 triệu độ (7×10^{8}K) và ở đó xảy ra "sự cháy" cacbon và oxi :



$$^{12}C + ^{12}C \rightarrow ^{23}Na + ^{1}H$$



$$^{12}C + ^{16}O \rightarrow ^{28}Si + \gamma$$

Sau đó xảy ra quá trình hấp thụ các hạt α để tạo thành các hạt nhân nặng hơn cho tới ^{40}Ca :



$$^{28}Si \xrightarrow{\alpha} ^{32}Si \xrightarrow{\alpha} ^{36}Ar \xrightarrow{\alpha} ^{40}Ca$$

Các ngôi sao tiếp tục co lại và nóng lên tới nhiệt độ 3 tỉ độ (3×10^{9}K), ở đó các hạt nhân giải phóng ra nơtron, proton và các hạt α rồi sau đó "bắt" lại. Kết quả là các hạt nhân có năng lượng liên kết thấp, cung cấp các nuclon để tạo ra các hạt nhân có năng lượng liên kết cao hơn.

Quá trình đó chỉ xảy ra trong ít phút rồi ngừng lại ở sắt (Fe, A = 56) và niken (Ni, A = 58) là những hạt nhân có năng lượng liên kết cao.

Quá trình toả nhiệt (khi các hạt nhân nhẹ kết hợp với nhau để tạo ra các hạt nhân nặng hơn) kết thúc khi tới Fe và Ni.

Muốn quá trình kết hợp tạo thành các hạt nhân nặng hơn Fe và Ni phải cung cấp năng lượng.

1.2.4. Sự tạo thành các nguyên tố nặng hơn Fe và Ni

Trên những ngôi sao cực lớn, nặng hơn Mặt Trời từ 8 đến 25 lần (đã quan sát được), khi đã tiêu thụ hết chất đốt (He), trong vòng một giây, các lớp bên ngoài bị nổ tung, bắn ra với tốc độ cỡ 15000 km/sec, còn phần bên ngoài gồm các hạt nhân Fe và Ni bị vỡ ra thành nơtron và proton n; proton lại bắt electron để tạo thành nơtron và toàn bộ ngôi sao co lại thành một sao nơtron với mật độ vật chất lớn khó tưởng tượng nổi(1). (Chẳng hạn một ngôi sao có kích cỡ bằng Trái Đất khi biến thành sao nơtron thì co lại tới mức có thể đặt gọn trong toà nhà của đài thiên văn Huston nước Mĩ.)

Sóng kích động từ vụ "sụp đổ" đó lan truyền qua lớp khí bao quanh vỏ, đốt nóng các khí đó và cung cấp năng lượng để tạo ra các hạt nhân nặng hơn.

Ngày nay, người ta đã quan sát được nhiều vụ nổ lớn như vậy, được gọi là vụ nổ siêu tân tinh (chẳng hạn vụ nổ quan sát được ngày 23/7/1987 từ Nam Bán cầu).

---

(1) Hiện tượng trên gọi là "cái chết của một ngôi sao".

Các vụ nổ đó đã làm bắn những mảnh vỡ vào không gian vũ trụ và qua hàng triệu năm, chúng kết hợp lại thành hiđro, heli và các nguyên tố khác để tạo thành các ngôi sao mới.

Mặt Trời của chúng ta là một trong những ngôi sao thuộc "thế hệ thứ hai" đó; còn Trái Đất và các hành tinh khác được tạo nên từ những mảnh vỡ của các ngôi sao lớn. Chính vì thế mà có sự khác nhau rất lớn về các nguyên tố tìm thấy trên Trái Đất và cac hành tinh khác.

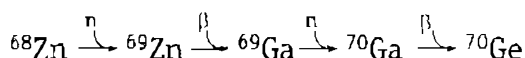
Các nguyên tố nặng hơn được tạo thành qua quá trình bắt nơtron.

– Quá trình bắt nơtron chậm (gọi là quá trình s).

Quá trình chậm xảy ra trong những giai đoạn kéo dài trong sự tiến triển của các ngôi sao.

Trong "quá trình s", hạt nhân bắt nơtron và phát ra tia γ.

Sau một thời gian, có thể kéo dài tới nhiều nghìn năm, hạt nhân phóng thả các phần tử β để tạo thành nguyên tố tiếp theo. Chẳng hạn, chuyển từ kẽm (^{68}Zn) sang germani (^{70}Ge).



$$^{68}Zn \xrightarrow{n} {}^{69}Zn \xrightarrow{\beta} {}^{69}Ga \xrightarrow{n} {}^{70}Ga \xrightarrow{\beta} {}^{70}Ge$$

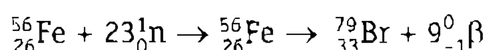
Các đồng vị bền của hầu hết các nguyên tố nặng được tạo thành từ quá trình s.

– Quá trình bắt nơtron nhanh (gọi là quá trình r)

Các đồng vị kém bền hơn và các đồng vị có A > 230 không thể được tạo thành từ "quá trình s" vì chu kì bán huỷ của chúng quá ngắn. Các nguyên tố này được tạo thành từ quá trình bắt nơtron nhanh.

Quá trình bắt nơtron nhanh có thể xảy ra ở các tai biến sao, trong vụ nổ của một ngôi sao "siêu tân tinh" khi nồng độ nơtron cực kì lớn xuất hiện trong khoảng thời gian cực kì ngắn.

Trong "quá trình r" nhiều nơtron bị bắt kèm theo nhiều sự phân huỷ β chỉ trong vòng một vài giây, chẳng hạn trong quá trình biến đổi từ ^{56}Fe đến ^{79}Br

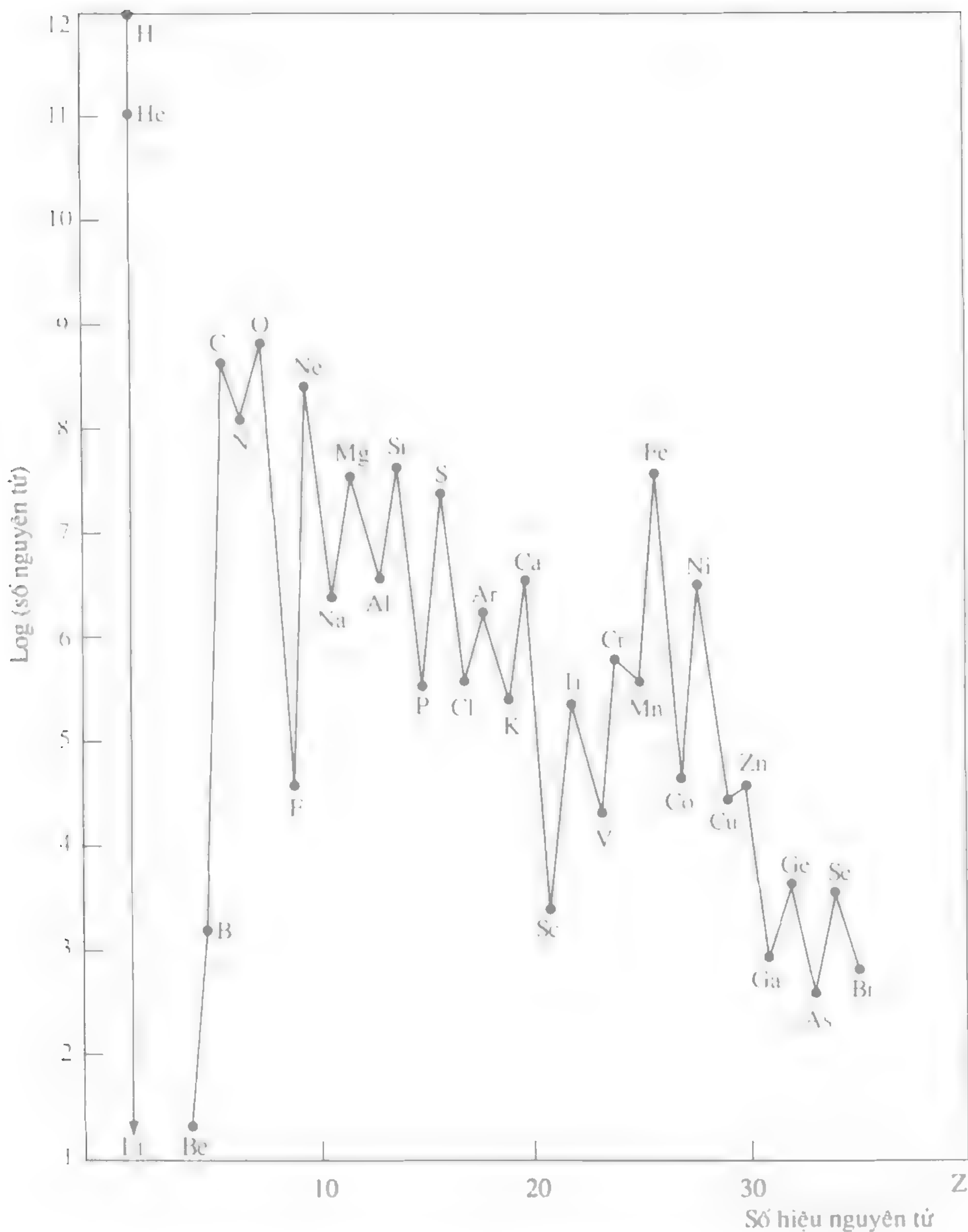


$$^{56}_{26}Fe + 23\,^{1}_{0}n \rightarrow {}^{56}_{26}Fe \rightarrow {}^{79}_{33}Br + 9\,^{0}_{-1}\beta$$

Lí thuyết về sự tạo thành các nguyên tố trình bày ở trên phù hợp với độ phổ biến tương đối của các nguyên tố trong vũ trụ.

– Độ phổ biến tương đối của một số nguyên tố trong vũ trụ

- 90 – 95% số nguyên tử trong vũ trụ là các nguyên tử hiđro.
- Heli chiếm từ 4% đến 9% tổng số tất cả các nguyên tử khác.
- Tất cả các nguyên tố khác chỉ chiếm khoảng 1% trong vũ trụ, kể cả lấy theo cơ sở khối lượng.
- Li, Be, B đặc biệt hiếm.



Hình 6.3. Độ phổ biến của các nguyên tố trong vũ trụ

- Các nguyên tố có số hiệu nguyên tử là số chẵn có nhiều hơn số nguyên tố có số hiệu nguyên tử là số lẻ.

- Nhìn chung, có sự giảm độ phổ biến của các nguyên tố từ oxi đến chì. Tuy nhiên, có một cực đại rất có ấn tượng về độ phổ biến tương đối xung quanh nguyên tố sắt.

- Không có nguyên tố bền với số khối lớn hơn khoảng 210.

Mặc dù thành phần các nguyên tố ở các hành tinh khác nhau có khác nhau (chẳng hạn trên Trái Đất và trên Mặt Trời) nhưng trong vùng rộng lớn của vũ trụ thì thành phần trung bình là tương tự nhau.

Như vậy, các nhà khoa học tin rằng sự tạo thành các nguyên tố đạt tới một trạng thái cân bằng động và điều đó dẫn tới hằng số tương đối về lượng các đồng vị.

Lí thuyết về sự tạo thành các nguyên tố hoá học nêu trên khẳng định một điều:

Toàn bộ thiên nhiên, kể từ những hạt nhỏ nhất cho tới những vật thể khổng lồ, từ hạt cát nhỏ bé cho đến Mặt Trời, các thiên hà... luôn luôn không ngừng xuất hiện và mất đi, diễn biến liên tục, vận động và biến đổi không ngừng.

2. CÁCH ĐẶT TÊN CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC

Khi tìm ra một nguyên tố hoá học mới, người ta đặt tên nó như thế nào?

Trải qua hàng ngàn năm lịch sử, các nhà khoa học đã trả lời câu hỏi đó bằng nhiều cách khác nhau.

Đa số các nhà khoa học đã chọn tên để tôn vinh một nhân vật, một địa danh hay để mô tả tính chất của nguyên tố mới. Ngay cả các nguyên tố đã biết từ lâu đời, không rõ ai đã tìm ra, nhưng tên của chúng vẫn có ý nghĩa từ nguyên.

Cho đến thời Trung Cổ, người ta chỉ mới biết có 9 nguyên tố: vàng, bạc, thuỷ ngân, đồng, chì, sắt, cacbon và lưu huỳnh.

Tên của các kim loại có nguồn gốc từ tiếng La tinh mô tả đặc tính của chúng hoặc mang tên nơi khai thác.

Aurum (vàng) có nghĩa là buổi "bình minh vàng".

Argentum (bạc) có nghĩa là "sáng bóng".

Stannum (thiếc) có nghĩa là "dễ nóng chảy".

Hydrargyrum (thuỷ ngân) có nghĩa là "nước bạc".

Plumbum (chì) có nghĩa là "nặng".

Cuprus (đồng) mang tên vùng Cyprus, nơi có nhiều mỏ đồng.

Tên của một số nguyên tố có lẽ bắt nguồn từ chữ Phạn (Sanscrit) có trước chữ La tinh.

Nhiều nước gọi tên nguyên tố theo tiếng nước mình. Chẳng hạn người Ănglô xắc xông cổ gọi thuỷ ngân là *mercury*, còn người Pháp gọi là *mercure*.

Mercure là tên sao Thuỷ, đó cũng là tên thần "Tín sứ" trong thần thoại La Mã; là tên thần "thương mại" trong thần thoại một số nước châu Âu khác. Sao Thuỷ là một vì tinh tú chuyển động nhanh qua bầu trời cũng như thuỷ ngân là kim loại lỏng duy nhất và "chạy" rất nhanh. Mặt khác, người ta ví nó với thần "thương mại" vì nó cũng linh hoạt như các bác lái buôn.

Cho đến thế kỉ XVII, hoá học vẫn chưa phải là một khoa học thực sự, nó mới chỉ là một số hiểu biết không định lượng, không có hệ thống. Vì vậy, việc đặt tên các nguyên tố mới tìm ra vẫn còn mang tính chất tuỳ tiện.

– Chẳng hạn như tên nguyên tố *stibi* là lấy từ tên chất stibi (Sb_2S_3) dùng để tô đen lông mày phụ nữ. Tên La tinh của nó là stibium, nghĩa là "dấu vết để lại".

Người Pháp gọi nguyên tố này là *antimoine* (ăngtimoan) bắt nguồn từ sự kiện sau: Để thử nghiệm tính chất sinh lí của nó, một tu sĩ trong một giáo đường đã trộn stibi vào thức ăn của đồng đạo và nhiều tu sĩ đã lâm nạn. Theo tiếng Pháp thì Anti có nghĩa là phản lại, còn moine có nghĩa là thầy tu.

– Zinkum (kẽm) bắt nguồn từ tiếng Ba tư: "Seng" có nghĩa là "đá", còn người Đức gọi nó là Zinke.

– Nguyên tố *asen* bắt nguồn từ tiếng Hy Lạp, arsenikos có nghĩa là giống đực bởi vì các nhà giả kim thuật tin rằng kim loại cũng có giống đực, giống cái như muôn loài sinh vật. Người Ba tư gọi nó là *zarnik* có nghĩa là màu vàng...

Cho đến cuối thế kỉ XVIII, khi hoá học đã trở thành một khoa học thì việc đặt tên các nguyên tố mới dựa vào một số nguyên tắc sau.

2.1. Cách đặt tên các nguyên tố

2.1.1. Đặt tên theo tính chất của các nguyên tố

Năm 1787, Lavoisier (Lavoadiê), nhà hoá học lỗi lạc người Pháp đề nghị nên thống nhất đặt tên các nguyên tố hoá học theo tính chất của mỗi nguyên tố.

Trong suốt 125 năm sau đó, hầu hết các nguyên tố đều được đặt tên ứng với tính chất của chúng. Chẳng hạn một số nguyên tố có tên gọi bằng tiếng Pháp như sau:

– *Hydrogene* (hiđro) theo chữ La tinh hydros-gen có nghĩa là sinh ra nước (khi đốt hiđro).

– *Oxygéne* (oxi) theo chữ La tinh oksys -gen có nghĩa là sinh ra axit (ở đây Lavoisier ngộ nhận axit nào cũng chứa oxi).

– *Brome* (brom) bắt nguồn từ chữ bromos có nghĩa là hôi, thối.

– *Argon* (agon) bắt nguồn từ chữ a-ergon có nghĩa là "không phản ứng".

Thật ra ban đầu Ramsay và Rayleigh (Rumxai và Railây), những người tìm ra nguyên tố này, đặt tên là "Aeron" có nghĩa là "từ không khí". Nhưng hai ông bị công kích kịch liệt vì tên aeron quá gần với tên Aaron trong Kinh Thánh nên phải đổi. Theo Kinh Thánh thì Aaron là anh cả của Moise và là đại giáo chủ của người Do Thái.

– *Radium* theo tiếng La tinh là "tia" được dùng để đặt tên cho nguyên tố rađi. Radon cũng là một nguyên tố phóng xạ tự nhiên.

Màu sắc của nguyên tố hoặc màu của vạch quang phổ đặc trưng của nguyên tố cũng thường được dùng để biểu thị tính chất của nguyên tố.

Chẳng hạn, tên các nguyên tố sau đây có nguồn gốc từ tiếng La tinh hay Hy Lạp có nghĩa là:

- Ioeides (Iot): màu tím.

- Iris (Iriđi): cầu vồng (do hợp chất có nhiều màu sắc khác nhau).

- Cesius (Xesi): màu xanh da trời.

- Indium (Inđi): màu chàm.

- Thalios (Tali): màu xanh lục.

v.v...

Tuy nhiên, trái với đề nghị của Lavoisier, nhiều nguyên tố vẫn được đặt tên theo các thiên thể, các nhân vật thần thoại, các nhà khoa học, các địa danh đã tìm ra nguyên tố, các quặng, các cây chứa nguyên tố, hoặc theo mê tín dị đoan; đôi khi tên nguyên tố còn chứa đựng lịch sử tìm ra chúng.

2.1.2. Đặt theo tên các thiên thể hoặc thiên thần

Ví dụ:

- Helium (*Heli*) là Mặt Trời.

- Tellurium (*Telu*) là Trái Đất.

- Selenium (*Selen*) là Mặt Trăng (được tìm ra gần như đồng thời với Telu).

- Cerium (*Ceri*) là tên sao Thần Nông.

- Uranium (*Urani*) là tên sao Thiên Vương.

- Neptunium (*Neptuni*) là tên sao Hải Vương.

- Plutonium (*Plutoni*) là tên sao Diêm Vương.

Hai nguyên tố đứng sau urani là neptuni và plutoni được đặt theo tên của hai ngôi sao đứng sau sao Thiên Vương trong Thái dương hệ.

- Promethium (*Promethi*) đặt theo tên thần Prôméthée (Prômêtê), vị thần đã lấy trộm lửa thiêng của Trời cho loài Người, nhờ vậy đã khai sáng ra nền văn minh đầu tiên của nhân loại. Vì thế Trời (tức thần Zeus (Dớt)) giận dữ, ra lệnh xiềng xích Prômêtê trên ngọn núi Capcadơ (Caucase), ngày ngày sai con kền kền đến moi gan...

- Vanadium (*Vanadi*) là tên nữ thần Vanadis của các dân tộc Scandinave.

- Titanium (*Titan*) là tên thần Titans.

- Tantalum (*Tantan*) là tên thần Tantanlos.

- Thorium (*Thori*) là tên thần Thor, thần chiến tranh của người Scanđinave.

- Cobalt (*Coban*) là tên thần Kobold, một vị hung thần làm trở ngại cho việc khai thác mỏ đồng. Những người thợ mỏ còn gọi coban là "đồng giả hiệu".

2.1.3. Đặt theo tên cây, tên quặng chứa nguyên tố đó

Ví dụ:

– Potassium (*Kali*) lần đầu tiên thu được từ cây Salsola kali. Người ta còn tìm thấy kali trong quặng potat (K_2CO_3) nên người Pháp và người Anh gọi kali là *potassium.*

– sodium (*Natri*) lần đầu tiên thu được từ quặng natrium. Về sau quặng natrium được gọi là quặng sođa (Na_2CO_3), vì vậy người Pháp và người Anh gọi natri là sodium.

2.1.4. Đặt theo tên các địa danh

Ví dụ:

– Ruthenium (*Ruteni*) theo gốc tiếng La tinh là tên nước Nga.

– Gallium (*Gali*) theo gốc La tinh là tên cổ của nước Pháp.

– Lutetium (*Lutexi*) theo gốc tiếng La tinh là tên thành phố Paris.

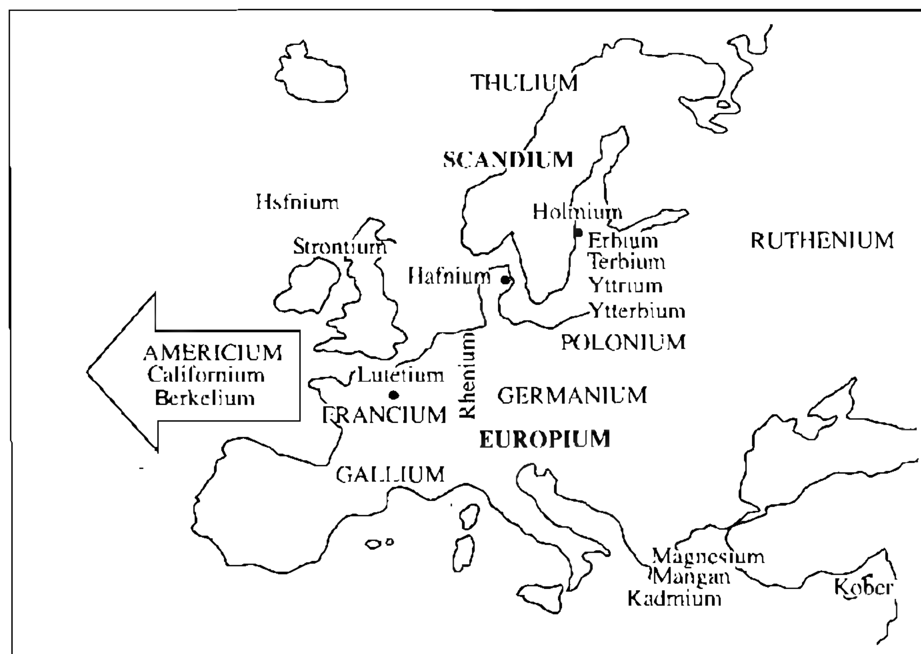
– Germanium (*Germani*) theo gốc La tinh là tên đế quốc Nhật-Nhĩ-Man.

– Polonium (*Poloni*) tên đất nước Balan (Poland).

– Ytterbium (*Ytterbi*) tên một làng thuộc đất nước Thuỵ Điển.

Có lẽ làng Ytterby thuộc đất nước Thuỵ Điển giữ kỉ lục thế giới vì có tới ... 4 nguyên tố mang tên làng ấy.

Đó là ytri (yttrium), tecbi (terbium), eribi (erbium) và ytecbi (ytterbium).



Hình 6.4. Một số nguyên tố được đặt tên theo các địa danh.

2.1.5. Đặt theo tên các nhà khoa học

Ví dụ:

– Curium (*Curi*), kí hiệu là Cm.

C là chữ cái đầu chữ Curi, m là chữ cái đầu chữ Marie. Đó là tên vợ chồng nhà bác học Pierre Curie (người Pháp) và Marie Sklodowska (người Ba lan).

Ông, bà là "cha mẹ" đã khai sinh ra hai nguyên tố poloni và rađi và có công khai sáng ra môn phóng xạ.

– Einsteinium mang tên nhà bác học lỗi lạc Albert Einstein, người Đức. Ông là tác giả của thuyết tương đối, có ảnh hưởng sâu sắc đến sự phát triển của vật lí học hiện đại.

– Nobelium (*Nobeli*) mang tên nhà hoá học người Thuỵ Điển là Nobel. Ông đã dành toàn bộ gia sản đặt giải thưởng Nobel.

– Fermium (*Fermi*) mang tên nhà vật lí học người Ý, người đã chế tạo ra pin urani (lò phản ứng hạt nhân) đầu tiên năm 1942.

– Lawrencium (*Lowrenxi*) mang tên nhà vật lí học người Mĩ, người đã chế tạo ra máy xiclotron, máy gia tốc hình khuyên, gia tốc các hạt nặng mang điện.

– Mendelevium (*Mendelevi*) mang tên nhà hoá học Nga là Mendeleep, người đã tìm ra định luật tuần hoàn, kim chỉ nam cho việc nghiên cứu nhiều ngành khoa học.

2.1.6. Đặt tên theo lịch sử tìm ra nguyên tố đó

Chẳng hạn, năm 1839, Mosander đặt tên cho nguyên tố ông tách ra được từ hợp chất của ceri là lantan. Theo tiếng Hy Lạp thì *lantan* có nghĩa là "sống ẩn náu".

Hai năm sau, cũng từ muối của ceri, ông nghĩ rằng mình đã tách thêm được một nguyên tố nữa và đặt tên là *điđi*. Theo tiếng Hy Lạp thì điđi có nghĩa là anh em sinh đôi, bởi vì "không thể tách rời anh em sinh đôi này ra khỏi lantan". Ở đâu có lantan thì ở đó có điđi.

Nhưng đến năm 1885, V.Vensbách (Welsbach) đã tách điđi thành ra hai nguyên tố mới và đặt tên là *Neođim* và *Prazeođim*. Theo tiếng Hy Lạp thì neođim có nghĩa là "anh em sinh đôi mới" và Prazeođim có nghĩa là "anh em sinh đôi xanh".

2.2. Việc tranh chấp tên các nguyên tố
Quy định của IUPAC về việc đặt tên các nguyên tố

2.2.1. Một số trường hợp tranh chấp tên các nguyên tố

Hầu hết các nguyên tố được biết hiện nay đều được đặt tên một cách ổn thoả. Nhưng đối với một số nguyên tố thì, tiếc thay, sự việc lại không diễn ra như vậy.

Ta hãy nêu một số sự việc như sau:

a) *Nguyên tố số 41 mang tên niobi hay columbi?*

Năm 1803, Ekeberg (Ekebec) tách ra được một nguyên tố mới từ quặng của titan. Ông đặt tên là *niobi*, bắt nguồn từ chỗ: theo thần thoại Hy Lạp thì Niobi là con gái của thần Tatan.

Nhưng về sau, người ta nhận thấy rằng: Niobi chính là nguyên tố đã được Hattret (Hatchett) phát hiện ra trước đó một năm và ông đã dự định đặt tên là *Columbi*.

Có điều lí thú là hơn một thế kỉ trước, viên toàn quyền đầu tiên của bang Conecticut (Mĩ) là Winthrop (Uynthơrốp) đã gửi về nước Anh một mẫu quặng và chính từ mẫu quặng đó, hơn 100 năm sau tức là năm 1802 Hatchett đã tách ra được một nguyên tố mới và đề nghị đặt tên là Columbi.

Cho mãi đến năm 1949, sau hơn 100 năm tranh chấp, tổ chức IUPAC (Hiệp hội quốc tế về hoá học lí thuyết và ứng dụng) đã quyết định nguyên tố số 41 chỉ mang một tên duy nhất là niobium (niobi).

b) *Nguyên tố số 104 mang tên kusatovi hay rutherfordium?*

Cuộc tranh chấp về tên của nguyên tố số 104 cũng kéo dài trong mấy chục năm.

Báo chí và các tài liệu khoa học của Liên Xô (cũ), các nước xã hội chủ nghĩa và các nước Scanđinavơ gọi nguyên tố 104 là Kusatovi để tôn vinh nhà bác học Kusatốp – cha đẻ ra nền nguyên tử học Xô Viết (Liên Xô cũ).

Báo chí Anh, Mĩ và một số nước phương Tây gọi là rutherfordium để ghi công nhà bác học người Anh là Rutherford – người đã tìm ra hạt nhân nguyên tử.

c) *Nguyên tố 105 được gọi là halnium hay nielsbohri?*

Cũng tương tự như nguyên tố 104, ở một số nước, người ta gọi nguyên tố 105 là halni (hani) để tưởng nhớ nhà bác học Đức O.Haln (Han), người góp phần đề xướng ra lí thuyết về sự phân rã của hạt nhân urani.

Ở một số nước khác người ta lại gọi nguyên tố 105 là nielsbohri để tôn vinh nhà bác học Đan Mạch Niels Bohr, người có công đặt nền móng cho lí thuyết cấu tạo nguyên tử.

2.2.2. Quy định tạm thời của IUPAC

Năm 1978, để tránh những phiền hà trong việc đặt tên các nguyên tố, tổ chức IUPAC đã khuyến cáo rằng: từ nay (ít nhất là trong tình hình lúc bấy giờ) *tên các nguyên tố từ 104 trở đi được đặt theo hệ thống các con số*:

Nil là 0; un là 1; bi là 2; tri là 3; quad là 4... cộng thêm tiếp vĩ ngữ um.

Nguyên tố 104 được gọi là unnilquadium.

Nguyên tố 105 được gọi là unnilpentium.

v.v...

Nhiều nhà hoá học không đồng tình nên đề nghị tổ chức IUPAC xem xét lại quyết định của mình và sẽ cho phép đặt tên các nguyên tố không theo nguyên tắc trên.

Há chẳng phải là một sự xúc phạm đối với các bậc "cha mẹ" đã tìm ra nguyên tố mà không có quyền đặt tên cho "con cái" hay sao!

2.2.3. Quyết định của IUPAC

Tháng 9 năm 1997, để chấm dứt các cuộc tranh chấp kéo dài giữa các trung tâm khoa học của các nước [chủ yếu là Hội Hoá học Mĩ, phòng thí nghiệm Dubna (Nga) và trung tâm GSC ở Darmstadt (Đức)] giành bằng phát minh và quyền đặt tên cho các nguyên tố mới từ 104 trở đi. Vào tháng 9 năm 1997, tại Genève (Thuỵ Sĩ), trong một hội nghị gồm thành viên của 40 nước tham gia, IUPAC đã ra quyết định sau và được đa số cộng đồng thế giới chấp nhận:

a) *Nguyên tố 104*

Được đặt tên là Rutherfordium, kí hiệu là Rf.

– Nguyên tố này mang tên nhà bác học Rutherford, người có công phát hiện ra hạt nhân nguyên tử.

Nguyên tố này không còn mang tên Kusatonium (Ku) mà trước đây Liên Xô và một số nước vẫn dùng.

b) *Nguyên tố 105*

Được đặt tên là Dubnium, kí hiệu là Db.

– Nguyên tố này mang tên thành phố Dubna (Nga), nơi đặt phòng thí nghiệm Dubna.

– Nguyên tố này không còn mang tên Halnium (Ha) hay Nielsbohrium (Ns) mà trước đây một số nước vẫn dùng.

c) *Nguyên tố 106*

Được đặt tên là Seaborgium (Sg).

– Nguyên tố này mang tên nhà bác học Mĩ là Gleen Seaborg (Xibo), người lãnh đạo tài ba phòng thí nghiệm Berkeley, nơi đã tổng hợp được hàng loạt các nguyên tố siêu uran.

Đây là trường hợp chưa từng có đối với một nhà khoa học khi còn sống.

d) *Nguyên tố 107*

Được đặt tên là Borhrium (Bh).

Nguyên tố này mang tên nhà bác học Đan Mạch Niels Bohr, người có công đặt nền móng cho lí thuyết cấu tạo nguyên tử.

e) *Nguyên tố 108*

Được đặt tên là Hassium (Hs).

Nguyên tố này mang tên địa danh Hass (Đức), nơi có trung tâm nghiên cứu các nguyên tố siêu nặng.

g) *Nguyên tố 109*

Được đặt tên là Meitnerium (Mt).

Nguyên tố này mang tên nhà nữ bác học Đức Lise Meitner, người cộng tác với Otto trong công trình nghiên cứu phản ứng phân chia hạt nhân.

f) *Nguyên tố 110 đến 118*

Cho đến tháng 9 năm 1997, tuy phòng thí nghiệm của một số nước thông báo đã tìm ra nguyên tố 110, 111, 114, 118 nhưng chưa được xác nhận nên IUPAC quy định từ nguyên tố 110 đến 118 tạm thời được đặt tên theo hệ thống các con số như quy định năm 1978. Như vậy:

– Nguyên tố 110* được mang tên là ununnilium, kí hiệu là Uun.

– Nguyên tố 111 được mang tên là unununium, kí hiệu là Uuu.

– Nguyên tố 112** được mang tên là ununbiium, kí hiệu là Uub.

– Nguyên tố 113 được mang tên là ununtriium, kí hiệu là Uut.

– Nguyên tố 114 được mang tên là ununquadium, kí hiệu là Uuq.

– Nguyên tố 115 được mang tên là ununpentium, kí hiệu là Uup.

– Nguyên tố 116 được mang tên là ununhexium, kí hiệu là Uuh.

– Nguyên tố 117 được mang tên là ununseptium, được kí hiệu là Uus.

– Nguyên tố 118 được mang tên là Ununoctium, được kí hiệu là Uuo.

* Đến tháng 8/2003,

IUPAC đã xác nhận việc tìm ra *nguyên tố 110* do phòng thí nghiệm Darmstadt (Cộng hoà liên bang Đức) tổng hợp và được đặt tên là darmstadtium, kí hiệu là Ds.

** Đến ngày 25/2/2010

IUPAC đã chính thức thừa nhận tên của nguyên tố 112 là copernicium, kí hiệu là Cn, do phòng thí nghiệm GSI tại Darmstadt (Cộng hoà liên bang Đức) và Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân (Nga) đã tổng hợp được.

Nhóm tác giả đề nghị đặt tên như trên để tưởng nhớ nhà thiên văn học Ba Lan là Copernic (1473-1543), người đã phát biểu : " Trái đất quay quanh Mặt Trời chứ không phải Mặt Trời quay quanh Trái Đất" như Kinh Thánh rao giảng. Phát biểu của ông là cơ sở thúc đẩy khoa học thiên văn phát triển.

Giấy chứng chỉ thừa nhận nguyên tố 112 mang tên ông được trao vào dịp kỉ niệm sinh nhật thứ 537 của ông.

Đây là nguyên tố nặng nhất cho đến nay, nặng gấp 285 lần nguyên tử hiđro, được IUPAC công nhận.

Hơn 100 nguyên tố hoá học khác nhau, hơn 100 lịch sử phát minh, hơn 100 tên gọi!

Dĩ nhiên là còn nhiều nguyên tố mới sẽ được tìm ra.

Sự đa dạng về tên các nguyên tố cũng nói lên phần nào lịch sử lâu đời và đầy màu sắc của môn hoá học.

PHẦN BẢY

XUẤT XỨ VÀ LỊCH SỬ TÌM RA CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC

– Trong bảng liệt kê sau đây tên các nguyên tố hoá học được sắp xếp theo thứ tự vần chữ cái (để tiện tra cứu).

– Đối với mỗi nguyên tố sẽ bao gồm các thông tin sau :

+ Tên nguyên tố (viết theo tên quốc tế), kí hiệu, xuất xứ của tên gọi.

+ Số thứ tự của nguyên tố trong bảng tuần hoàn (Z).

+ Người tìm ra nguyên tố hoặc tách được nguyên tố dưới dạng nguyên chất.

+ Năm tìm ra nguyên tố.

+ Một vài ghi chép có liên quan.

Actinium (actini, Ac) Z = 89

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ Hy Lạp *aktis* có nghĩa là *"dòng hay tia"* bởi vì actini là nguồn phóng xạ α rất mạnh.

Năm *1899* nhà hoá học Pháp là A.L *Debierne* (Đơbiecnơ) đã thu được Ac từ quặng uranit và chất này có những tính chất tương tự thori. Năm 1902, độc lập với nhà hoá học Pháp, nhà hoá học Đức F.O.Giesel (Giê-den), cũng tìm ra nguyên tố 89 và đặt tên là emanium. Ông cho rằng nguyên tố actini do Debierne điều chế được thực ra là hai đồng vị của ^{227}Th và ^{230}Th. Tuy nhiên, nhà hoá học Đức đã nhầm lẫn, do đó tên actinium và người tìm ra nó là Debierne vẫn được giữ cho đến ngày nay.

Đồng vị bền nhất của ^{227}Ac có chu kì bán huỷ là 21,77 năm.

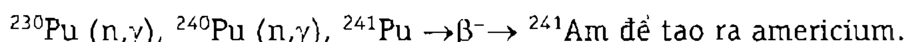
Aluminium (nhôm, Al) Z = 13

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ La tinh *alum* nghĩa là *phèn*. Theo người La Mã cổ thì bất cứ chất nào có vị "chua chát" như phèn đều gọi là phèn.

Thật ra, người ta đã biết nhôm từ thời tiền sử nhưng mãi đến năm *1825*, nhà vật lí Đan Mạch là *H.C.Oested* (Ơtxtet) mới tách được nhôm ở dạng thô và hai năm sau, năm *1827*, nhà hoá học Đức là *Wöhler* mới cô lập được nhôm ở dạng nguyên chất.

Americium (Am) Z = 95

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ "*America*" là "châu Mĩ" nơi đầu tiên tổng hợp ra nguyên tố này. Năm *1944*, tại phòng thí nghiệm Berkeley thuộc trường đại học Califonia, nhóm các nhà khoa học (R.A. James, L.O.Morgan, A. Ghiorso) dưới sự lãnh đạo tài ba của Glenn.T.Seaborg (Xibo) đã dùng phản ứng hạt nhân


^{230}Pu (n,γ), ^{240}Pu (n,γ), $^{241}Pu \rightarrow \beta^- \rightarrow$ ^{241}Am để tạo ra americium.

Americium là nguyên tố thứ 6 trong dãy Actinit và đặt tên như vậy để "đối xứng" với nguyên tố europium (có nghĩa là châu Âu) cũng là nguyên tố thứ 6 trong dãy Lantanit.

Chu kì bán huỷ của đồng vị bền nhất ^{243}Am là 73,70 năm.

Antimony (antimon, Sb) Z = 51

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ Hy Lạp *anti + monos* có nghĩa là "*không ở một mình*" bởi vì nó được tìm thấy trong rất nhiều hợp chất.

Kí hiệu Sb có nguồn gốc từ tên nguyên thuỷ của nó là stibium xuất phát từ tiếng Hy Lạp stibi là "đánh dấu" vì nó được dùng để kẻ lông mày, lông mi. Về sau, tên stibium được đổi thành antimony.

Quặng stibnite (Sb_2S_3) và stibine (SbH_3) là hai loại quặng người ta biết từ thời cổ.

Vào năm *800* (sau công nguyên), Geber đã tìm ra và cô lập được nó.

Argon (agon, Ar) Z - 18

Lúc đầu, kí hiệu của argon là "A", đến năm 1957 mới đổi thành Ar. Tên nguyên tố xuất phát từ chữ Hy Lạp argos là "lười nhác hay không hoạt động".

Nó được tìm ra năm *1894* bởi nhà hoá học người Scotland và Ramsay và nhà vật lí người Anh là Lord Rayleigh bằng cách so sánh trọng lượng phân tử của nitơ tách ra từ không khí lỏng và nitơ điều chế bằng phương pháp hoá học.

Argon là khí hiếm đầu tiên đã cô lập được.

Arsenic (asen, As) Z = 33

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ La tinh *arsenicum* và chữ Hy Lạp *arsemikos* vì quặng arsenic có "*màu vàng*" (As_2S_3 là một chất độc, chết người đã biết từ thời cổ).

Geber đã tìm ra arsenic từ năm *800* và cô lập được nó, ông còn mô tả cả phương pháp điều chế.

A.Magnus là người châu Âu đầu tiên đã tách ra được nguyên tố này vào năm 1250.

Astatine (atatin, At) Z = 85

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ Hy Lạp *astatos* là "*không bền*" vì thực tế nó là một nguyên tố không bền.

Năm 1931, người ta thông báo là đã phát hiện ra nguyên tố này trong tự nhiên và đặt tên là alabamine. Sau đó, đã xác định được rằng hạt nhân nguyên tố này rất không bền, không tồn tại trong thiên nhiên. Vì vậy, phát hiện trên không được công nhận.

Năm *1940* nhóm các nhà vật lí D.R Corson, K.R Mackenzie, E.Segre đã tổng hợp được nguyên tố 85 tại phòng thí nghiệm Berkeley thuộc trường đại học California (Mĩ) bằng cách bắn phá bitmut bởi các hạt anpha trong phản ứng : ^{209}Bi (^{4}He, 2n) ^{211}At[1].

Độc lập với công trình trên, các nhà khoa học Thuỵ Sĩ dựa vào việc tìm thấy một số vạch quang phổ tia X của nguyên tố 85 cũng đòi quyền phát minh và đặt tên là Helvelium. Tuy nhiên, do chu kì bán huỷ của nó quá ngắn ngủi, không thể tiến hành bất kì thí nghiệm hoá học nào để tách ra và nhận dạng được nó.

Chu kì bán huỷ của đồng vị bền nhất ^{210}At là 8,1 giờ.

(Gần đây đã xác định được astatine tồn tại trong tự nhiên với lượng vô cùng nhỏ: 25 g trong toàn bộ vỏ Trái Đất.)

Barium (bari, Ba) Z = 56

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ Hy Lạp *barys* là *"nặng"* do tìm thấy trong đá spat ($BaSO_4$) khá nặng.

Nó được tìm ra bởi nhà dược sĩ kiêm hoá học Thuỵ Điển là C.W.Sheele vào năm 1774 và người đầu tiên tách ra được là nhà hoá học Anh Humphry Davy vào năm *1808*.

Berkelium (Bk) Z = 97

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ *Berkeley*, một thành phố thuộc bang California, ơ đó lần đầu tiên đã tổng hợp được nguyên tố này vào năm *1949*. Nhóm các nhà khoa học Mĩ gồm S.G. Thompson, A. Ghiorso, dưới sự lãnh đạo của G.T, Seaborg đã dùng các hạt anpha bắn phá bia americium trong phản ứng hạt nhân sau để "tạo" ra nguyên tố 97 : ^{241}Am (^{4}He, 2n) ^{243}Bk.

Berkelium là nguyên tố thứ tám trong dãy Actinit và được đặt tên như vậy để 'đối xứng" với tên terbium (Ytterby là một thành phố của Thuỵ Điển, ở đó có mỏ ytterbite là nguồn sản xuất terbium). Terbium là nguyên tố thứ tám trong dãy Lantanit.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{241}Bk là 1400 năm.

Beryllium (beri, Be) Z = 4

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ Hy Lạp *beryllos* là *"Beryl"* ($3Be.Al_2O_3.6SiO_2$), đó là một loại đá quý trong suốt hoặc xanh nhạt, trong đó có beryllium.

Beri được nhà hoá học người Pháp Vauquelin tìm ra năm *1797*, trong đá beryl và ngọc bích. Năm 1828, kim loại beri lần đầu tiên được sản xuất bởi nhà hoá học kiêm dược sĩ người Pháp là A.B. Bussy và độc lập với Bussy là nhà hoá học Đức là F. Wholer.

---

(1) Quy ước viết tắt phản ứng hạt nhân: Bia (đạn, hạt tạo thành) nguyên tố mới
Ví dụ trên: $^{209}Bi + ^{4}He \rightarrow ^{211}At + 2n$.

Vì muối của beryllium có vị ngọt nên trong nhiều năm người ta gọi nguyên tố số 4 là glucinium xuất phát từ chữ Hy Lạp glukys là "ngọt" và kí hiệu là Gl.

Cho đến năm 1949. IUPAC quyết định đặt tên cho nguyên tố số 4 là Beryllium dựa trên tên gọi thịnh hành của nó.

Bismuth (bitmut, Bi) Z = 83

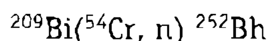
Tên nguyên tố xuất phát từ chữ Đức *weisse masse* có nghĩa là *"khối màu trắng"* do màu của các oxit (về sau chữ weisse masse bị biến dạng thành *wismuth.*

Người xưa không phân biệt được bitmut và chì. Tuy được Geber phát hiện ra từ năm *800* nhưng đến năm *1753* nhà hoá học người Pháp là C.F. Geoffroy mới xác định được một cách chắc chắn và phân biệt được bitmut và chì.

Bohrium (Bh) Z = 107

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tên nhà vật lí Đan Mạch là *Niels Bohr,* người đã có công phát triển lí thuyết cấu trúc electron trong nguyên tử.

Nguyên tố này lần đầu tiên được tổng hợp tại phòng thí nghiệm GSI thuộc trung tâm nghiên cứu ion nặng ở Darmstadt (cộng hoà liên bang Đức) vào năm *1981* dưới sự lãnh đạo của các nhà khoa học Đức là P. Armbruster và G.Münzenber. Sau đây là phản ứng hạt nhân tạo ra Bh :



$$^{209}Bi(^{54}Cr, n)\ ^{252}Bh$$

Chu kì bán huỷ dài nhất đối với đồng vị ^{267}Bh là 17 giây.

Boron (bo, B) Z = 5

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Ả Rập *buraq* có nghĩa là *"trắng"*.

Mặc dầu các hợp chất của nó đã được biết từ hàng ngàn năm trước nhưng mãi đến năm *1808,* các nhà hoá học Pháp là Gay-Lussac và Thenard mới tách được nguyên tố này ở dạng chưa tinh khiết. Cuối cùng, nhà hoá học Anh là Humphry Davy mới điều chế được bo nguyên chất bằng phương pháp điện phân, cũng vào năm 1808.

Bromine (brom, Br) Z = 35

Tên nguyên tố bắt nguồn từ tiếng Hy Lạp *bromos* nghĩa là *"khó ngửi"*. Nhà hoá học Đức là Carl Lowig đã điều chế được brom từ năm *1825* nhưng người công bố đầu tiên lại là nhà hoá học kiêm dược sĩ người Pháp là Balard vào năm 1826, do đó quyền phát minh ra nguyên tố brom thuộc về Balard.

Cadmium (cadimi, Cd) Z = 48

Tên nguyên tố bắt nguồn từ chữ Hy Lạp *kadmeia* tức là *"calamine* ($ZnCO_3$)" được tìm thấy trong tự nhiên ở dạng không nguyên chất. Kadmeia cũng là tên của pháo đài Theber, một thị trấn ở miền Trung Hy Lạp – Pháo đài được gọi theo tên của hoàng tử Cadmus, vì vậy, quặng $ZnCO_3$ được gọi là kadmeia.

Nguyên tố cadmium được nhà vật lí người Đức F. Stromeyer tìm ra và lần đầu tiên cô lập được nó vào năm *1817*.

Caesium (xesi, Cs) Z = 55

Tên Caesium bắt nguồn từ tiếng La tinh *Caesies* có nghĩa là *"màu xanh da trời"*, màu đặc trưng của caesium trong vạch quang phổ. Tuy từ caesium được quốc tế công nhận nhưng người ta vẫn quen dùng từ cesium theo tiếng Anh.

Nguyên tố số 55 được nhà hoá học Đức W.Bunsen và nhà vật lí (cũng người Đức) là R. Kirchhoff phát hiện ra năm *1860* và đến năm *1882* nhà hoá học Đức Carl Setterberg mới tách được nó.

Calcium (canxi, Ca) Z = 20

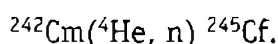
Tên nguyên tố xuất phát từ chữ La tinh *calc* có nghĩa là *"vôi* (CaO)" hay đá vôi ($CaCO_3$), từ đó người ta tìm thấy canxi.

Năm *1808*, nhà hoá học Anh là H. Davy, với sự giúp đỡ của nhà hoá học Thuỵ điển là Berzelius đã tìm ra canxi bằng cách điện phân vôi sống.

Californium (Cf) Z = 98

Tên nguyên tố xuất phát từ tên bang và cũng là tên trường đại học California, nơi lần đầu tiên tổng hợp được nguyên tố số 98.

Năm *1950*, nhóm các nhà khoa học Mĩ gồm K.Street, A.Ghiorso dưới sự lãnh đạo của Glenn Seaborg, tại phòng thí nghiệm Berkeley thuộc trường đại học California đã tổng hợp được nguyên tố 98 qua phản ứng hạt nhân :



$$^{242}Cm(^{4}He, n)\ ^{245}Cf.$$

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị bền nhất ^{251}Cf là 900 năm.

Carbon (cacbon, C) Z = 6

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng La tinh *carbo* là *"than"*.

Nó được biết từ thời tiền sử, khoảng 3750 năm trước công nguyên, dưới dạng than hay mồ hóng. Đến năm 1773, nhà hoá học Pháp là A.Lavoisier mới liệt kê nó vào danh sách các nguyên tố hoá học. Đến năm 1797, nhà hoá học Anh là S. Tennant mới chứng tỏ được rằng kim cương là cacbon nguyên chất (kim cương đã được biết đến từ 2500 năm trước Công nguyên)

Cerium (xeri, Ce) Z = 58

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ *Ceres* là *sao Thần nông* của người La Mã. Tiểu hành tinh Ceres được nhà thiên văn học người Italia là G. Piazzo tìm ra năm 1801. Hai năm sau, năm 1803, nhà hoá học người Đức là Klaproth đã tìm ra nguyên tố này (số 58) và gọi là ocroite (ochroite) và nó có màu vàng.

Cũng thời gian đó, độc lập với công trình của Klaproth, các nhà hoá học Thuỵ Điển là Berzelius và Hisinger cũng tìm ra nguyên tố số 58 và đặt tên là Ceria.

Đến năm 1875, nhà địa chất học kiêm hoá học người Mĩ là Hillebrand và nhà hoá học Mĩ là Norton đã tách được cerium nguyên chất.

Chlorine (clo, Cl) Z = 17

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ Hy Lạp *chlooros* nghĩa là *"vàng lục"*.

Nhà hoá học kiêm dược sĩ Scheele, người Thuỵ Điển đã tìm ra nguyên tố này năm *1774*. Đến năm *1808*, nhà hoá học Anh là Humphry Davy mới chứng tỏ được rằng nó là một nguyên tố và đặt tên là Clorine.

Chromium (crom, Cr) Z = 24

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ chữ Hy Lạp là *Chroma* có nghĩa là *"màu sắc"* do các nơi nhiều hợp chất của crom đều có màu.

Crom được nhà hoá học người Pháp là Vauquelin (Vôcơlanh) phát hiện vào năm *1797* và cũng chính ông đã tách ra được nó vào năm 1798.

Cobalt (coban, Co) Z = 27

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Đức *Kobald*, có nghĩa là *"yêu tinh, ác quỷ"*. Do mê tín, những người thợ mỏ đặt tên như vậy vì trong quặng coban có arsen làm hại sức khoẻ thợ mỏ. Hơn nữa, trông quặng bề ngoài có vẻ kim loại nhưng khi luyện theo phương pháp thông thường thì không ra kim loại.

Tên coban còn xuất phát từ tiếng Hy Lạp *Kobalos* có nghĩa là "mỏ".

Coban được nhà hoá học Thuỵ Điển là Brandt tìm ra năm *1735*.

Copper (đồng, Cu) Z = 29

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng La tinh *Cuprum* là tên hòn đảo *"Cyprus"* (Xiprus). Ở đó lần đầu tiên người La Mã khai thác quặng đồng.

Người ta đã biết tới đồng từ thời tiền sử, khoảng 9000 năm trước công nguyên ở khu vực Trung Đông.

Đồng là một trong những vật liệu quan trọng nhất đối với loài người; đồng đã đánh dấu một thời đại mới trong lịch sử văn minh của xã hội loài người : thời đại đồ đồng.

Curium (Cm) Z = 96

Tên nguyên tố xuất phát từ tên cặp vợ chồng người Pháp : nhà vật lí *Pierre Curie* và nhà hoá học *Marie Curie* là những người đã tìm ra nguyên tố radium và polonium.

Nguyên tố curium đã được các nhà khoa học Mĩ dưới sự lãnh đạo của nhà hoá học Seaborg tổng hợp được vào năm *1944* tại phòng thí nghiệm Berkeley thuộc trường đại học California bằng phản ứng hạt nhân:



$$^{239}Pu\ (^{4}He,\ n)\ ^{242}Cm.$$

Vì là thành viên thứ chín trong dãy actinit, người ta đặt tên nguyên tố này là curium để tôn vinh công lao của ông bà Pierre và Marie Curie, đồng thời để đối xứng với nguyên tố thứ 9 tương đồng với nó thuộc dãy Lantanit được đặt theo tên nhà hoá học đất hiếm người Hà Lan là Gadolin.

Chu kì bán huỷ của đồng vị bền nhất ^{247}Cm là 15,6 triệu năm.

Dubnium (Db) Z = 105

Tên nguyên tố được đặt theo địa danh Dubna tại nước Nga nơi đặt Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân.

Bản quyền tổng hợp ra nguyên tố được trao cho nhóm các nhà khoa học Nga tại Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân tại Dubna dưới quyền điều khiển của viện sĩ Flerov vào năm 1970, đồng thời cũng được trao cho nhóm các nhà khoa học Mĩ tại trường đại học California dưới sự điều khiển của A. Ghiorso.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{262}Db là 34 giây.

Dysprosium (đíprozi, Dy) Z = 66

Tên nguyên tố bắt nguồn từ chữ Hy Lạp *dysprositos* có nghĩa là *"khó lấy được"* do những khó khăn khi tách nguyên tố đất hiếm này từ quặng holmium.

Đầu tiên, nhà hoá học Thuỵ Sĩ là Delafontaine (Đờ la phông ten nơ) công bố đã tìm ra nguyên tố này trong quặng samackit vào năm 1878 và đặt tên là philippia. Về sau, người ta phát hiện ra rằng philippia là hỗn hợp của terbium và erbium.

Sau này, nhà hoá học Pháp là Lecoq de Boisbaudran (Lơ cốc đờ boabođơrông) đã tìm thấy trong một mẫu quặng holmium và được nhận quyền phát minh vào năm *1886*.

Lần đầu tiên, nhà hoá học Pháp là Urbain đã tách ra được dysprosium vào năm 1906.

Einsteinium (Es) Z = 99

Nguyên tố được đặt theo tên nhà vật lí người Đức là *Albert Einstein*, người khai sáng ra thuyết tương đối.

Với sự cộng tác của các nhà khoa học Mĩ từ phòng thí nghiệm quốc gia Argonne ở Illinois, phòng thí nghiệm khoa học Alamos, bang New Mexico, phòng thí nghiệm Berkeley, trường đại học California, lần đầu tiên người ta đã tìm thấy ^{252}Es, trong đó bụi phóng xạ của một vụ thử vũ khí nhiệt hạch vào năm *1952*.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{252}Es là 472 ngày.

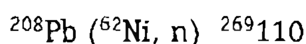
Darmstadium (Ds) Z = 110

Nguyên tố được đặt theo tên địa danh *Darmstadt*, nơi đặt trung tâm nghiên cứu các ion nặng GSI.

Vào tháng 11 năm *1994,* lần đầu tiên các nhà khoa học đa quốc gia làm việc tại GSI ở Darmstadt thuộc Cộng hoà Liên bang Đức đã tổng hợp được nguyên tố này.

Nhóm các nhà khoa học đa quốc gia gồm các nhà khoa học làm việc ở GSI (Đức), các nhà khoa học ở Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân Dubna (Nga), trường Đại học Comenius (Bratislavi, Slovakia) và trường Đại học Jyvaskyla (Phần Lan).

Nguyên tố 110 được tổng hợp qua phản ứng :

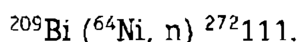

$$^{208}Pb\ (^{62}Ni,\ n)\ ^{269}110$$

Chu kì bán huỷ dài nhất thuộc đồng vị $^{281}110$ là 1,1 phút.

Nguyên tố 111

Vào tháng 12 năm *1994*, nguyên tố 111 được tổng hợp tại trung tâm nghiên cứu các ion nặng GSI tại Darmstadt thuộc Cộng hoà Liên bang Đức do nhóm các nhà khoa học đa quốc gia gồm các nhà khoa học của trung tâm GSI (Đức) của trường đại học Comenius (Bratislava, Slovakia) của trường đại học Jyvaskyla (Phần lan).

Nguyên tố 111 được tổng hợp bằng phản ứng hạt nhân :

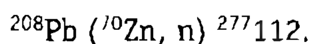

$$^{209}Bi\ (^{64}Ni,\ n)\ ^{272}111.$$

Chu kì bán huỷ dài nhất là của đồng vị $^{272}111$ là 0,015 giây. Nhóm tác giả trên đề nghị đặt tên nguyên tố 111 là *Roentgenium* để tôn vinh nhà vật lí Röentgen – người đã tìm ra tia X – nhưng chưa được IUPAC thừa nhận.

Nguyên tố 112

Nguyên tố 112 được tổng hợp lần đầu tiên tại trung tâm GSI (Đức) vào tháng 12 năm *1996* do nhóm các nhà khoa học đa quốc gia nêu trên (nhóm tác giả của nguyên tố 111).

Các nhà khoa học đã dùng phản ứng hạt nhân sau để tổng hợp nguyên tố 112 :


$$^{208}Pb\ (^{70}Zn,\ n)\ ^{277}112.$$

Chu kì bán huỷ dài nhất là đồng vị $^{285}112$ là 11 phút.

Nhóm tác giả trên đề nghị đặt tên nguyên tố 112 là "*Copernicium*" để tỏ lòng nhớ ơn tới nhà thiên văn học Copernic (1473 – 1543) với kí hiệu của nguyên tố là "Cp".

Tháng 7 năm 2009, tổ chức IUPAC đã gửi công văn cho giáo sư S.Hofmam (người lãnh đạo nhóm khoa học) chính thức thừa nhận nguyên tố mới 112.

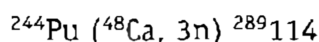
Nguyên tố 113

Vào năm *2003*, nhóm các nhà khoa học tại Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân Dubna (Nga) và các nhà khoa học làm việc tại phòng thí nghiệm quốc gia Lawrence Livermore (Mĩ) đã tổng hợp được nguyên tố 113 nhưng chưa được IUPAC công nhận.

Nguyên tố 114

Vào tháng 11 – 12 năm *1998*, nguyên tố 114 đã được tổng hợp tại Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân Dubna (Nga) do nhóm các nhà khoa học đa quốc gia gồm nhóm Dubna và nhóm làm việc tại phòng thí nghiệm Lawrence tại Livermore, bang California (Mĩ).

Nhóm thí nghiệm đã dùng phản ứng hạt nhân sau:



$$^{244}Pu\ (^{48}Ca,\ 3n)\ ^{289}114$$

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị $^{289}114$ là 21 giây.

Hiện chưa được IUPAC công nhận.

Nguyên tố 115

Vào năm *2003*, nhóm các nhà khoa học Dubna (Nga) và các nhà khoa học Lawrence Livermore thông báo đã tổng hợp được nguyên tố 115 nhưng chưa được IUPAC công nhận.

Nguyên tố 116

Vào tháng 7 năm *2000*, tại Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân Dubna (Nga) lần đầu tiên người ta đã tổng hợp được nguyên tố 116 bằng phản ứng hạt nhân sau :



$$^{248}Cm\ (^{48}Ca,\ 4n)\ ^{292}116$$

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị $^{292}116$ là 0,03 giây.

Công trình trên được thực hiện bởi nhóm khoa học đa quốc gia gồm các nhà khoa học Dubna (Nga) và các nhà khoa học thuộc phòng thí nghiệm quốc gia Lawrence, Livermore California (Mĩ).

Hiện IUPAC chưa công nhận việc tìm ra nguyên tố trên.

Nguyên tố 118

Các kết quả được công bố trong ấn bản tháng 10 năm 2006 của tạp chí Physical Review cho biết:

Các nhà nghiên cứu của phòng thí nghiệm quốc gia Lawrence Livermore cộng tác với các nhà nghiên cứu Dubna đã phát hiện ra 3 nguyên tử của nguyên tố 118 khi dùng các ion canxi bắn phá bia californium.

Cho đến nay thì nguyên tố 118 là nguyên tố nặng nhất mà người ta đã biết được. Nó nằm ở nhóm VIII trong hệ thống tuần hoàn, phía dưới khí trơ radon.

IUPAC chưa công nhận việc tìm ra nguyên tố trên.

Erbium (Er) Z = 68

Tên nguyên tố xuất phát từ tên một thành phố của Thuỵ Điển là *"Ytterby"* (cách Stockholm khoảng 3 dặm), ở đó người ta khai thác quặng gactolinit và từ quặng này người ta tìm ra nguyên tố erbium.

Nguyên tố erbium được nhà hoá học Thuỵ Điển là Mosander tìm ra năm *1843* trong một mẫu yttrium. Ông tách yttrium thành hai : một muối màu hồng được ông gọi là terbium và một peoxit màu vàng đậm ông gọi là erbium.

Năm 1860, nhà hoá học người Đức là Berlin phân tích yttrium thì thấy chỉ có yttrium và một muối màu hồng, ngày nay gọi là erbium chứ không phải là terbium.

Sau này, tất cả các nhà hoá học đều *đồng ý với Berlin* xác định muối đất hiếm có màu hồng la erbium.

Europium (Eu) Z = 63

Tên nguyên tố xuất phát từ tên lục địa *"Europi"* (châu Âu). Năm *1896*, nhà hoá học người Pháp là Demarcay (Đơmaccây) tách từ quặng samaria được muối magie – samari nitrat và năm sau, năm *1901* cũng chính ông là người đầu tiên cô lập được nguyên tố này.

Fermium (Fm) Z = 100

Người ta đặt tên nguyên tố thứ 100 như trên để tôn vinh nhà vật lí học người Italia là *Enrico Fermi* là người đầu tiên đã xây dựng được lò phản ứng hạt nhân.

Hạt nhân Fm đã được tìm thấy trong tro bụi phóng xạ của một vụ thử vũ khí nhiệt hạch năm 1952. Công trình này là do sự hợp tác của các nhà khoa học Mĩ thuộc phòng thí nghiệm quốc gia Argonne, phòng thí nghiệm Alamos và phòng thí nghiệm Berkeley.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{257}Fm là 100 ngày.

Fluorine (flo, F) Z = 9

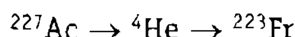
Tên nguyên tố xuất phát từ chữ La tinh *fluere* có nghĩa là *"chất làm chảy"* bởi vì chất fluospar (CaF_2) được dùng làm chất chảy trong luyện kim do nó có nhiệt độ nóng chảy thấp.

Vào năm *1771*, nhà hoá học Thuỵ Điển là Scheele phát hiện ra nguyên tố này trong axit flohiđric, tuy nhiên ông không cô lập được nó. Mãi đến năm *1886*, nhà hoá học người Pháp là Moissan mới tách ra được.

Francium (Fr) Z = 87

Nguyên tố được đặt tên như trên để tôn vinh nước Pháp là *"France"* nơi nhà vật lí Perey đã tìm ra nguyên tố này tại viện Curie ở thủ đô Paris của nước Pháp.

Nguyên tố được tìm ra vào năm *1939* trong quá trình phân huỷ phóng xạ tia anpha α của actini-227.



$$^{227}Ac \rightarrow {}^{4}He \rightarrow {}^{223}Fr$$

Người ta cũng gọi là actini-K và có chu kì bán huỷ là 22 phút.

Trước đó, vào năm 1930, người ta công bố là đã tìm ra nguyên tố 87 và đặt tên là Virginium. Lại có thêm một công bố tương tự như vậy và người ta gọi nó là moldavium.

Tuy nhiên, cả hai công bố trên đều không đúng.

Gadolinium (Gd) Z = 64

Tên nguyên tố xuất phát từ quặng *gadolinite*, trong đó người ta tìm ra nguyên tố 64 ; đồng thời cũng là tên nhà hoá học đất hiếm Phần Lan là "Johan Gadolin".

Nguyên tố 64 được nhà hoá học Thuỵ Sĩ là Marignac (Mari nhắc) tìm ra năm *1880*, ông chế hoá ra được một oxit màu trắng từ quặng samarkite và ông gọi là Yo ; năm 1886 nhà hoá học người Pháp là Boisbaudran (Boabôđrăng) tách ra được nguyên tố này và đặt tên là gadolinium.

Gallium (Ga) Z = 31

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng La tinh *gallia* có nghĩa là "*France*" (nước Pháp), cũng có thể là từ tiếng La tinh gallus có nghĩa là "lecoq" (con gà trống) bởi vì nguyên tố được tìm ra bởi nhà hoá học người Pháp là Lecoq de Boisbaudran từ quặng sunfua kẽm vào năm *1875*.

Đến năm *1878*, lần đầu tiên Boisbaudran đã tách ra được gali bằng phương pháp điện phân.

Nguyên tố này đã được Menđeleep gọi là "eka aluminium" và tiên đoán các tính chất của nó cung như vị trí trong hệ thống tuần hoàn từ năm 1871.

Germanium (Ge) Z = 32

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng La tinh *gennania* có nghĩa là "*Germany*" (nước Đức).

Vào năm *1886*, nhà hoá học người Đức là Winkler (Vincơle) đã phát hiện ra nguyên tố này từ quặng argyrodite ($GeS_2.4Ag_2S$) và cũng chính ông đã cô lập được nó.

Cũng như trường hợp trên (nguyên tố Ga), Menđeleep đã tiên đoán sự tồn tại của nguyên tố này và gọi là "eka silicon". Ông cũng tiên đoán các tính chất lí hoá học cũng như xác định vị trí của nó trong hệ thống tuần hoàn.

Gold (vàng, Au) Z = 79

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Phạn *Jval* có nghĩa là toả sáng, từ tiếng Đức *gulth* là kim loại toả sáng và từ tiếng Anglo-Saxon *gold*.

Kí hiệu hoá học của vàng có nguồn gốc từ tiếng La tinh *aurum* có nghĩa là thần bình minh Aurora.

Vàng được biết từ thời tiền sử. Ít ra là từ 6000 năm trước công nguyên.

Hafnium (hafini, Hf) Z = 72

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng La tinh *hafnia* có nghĩa là *"Copenhage"*.

Năm 1911, nhà hoá học người Pháp là G.Urbain (Uốc banh) công bố là đã tìm ra nguyên tố số 72 trong một mẫu đất hiếm và đặt tên là celtium.

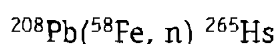
Về sau nhà vật lí Đan Mạch Niels Bohr đã dựa vào cấu hình electron để tiên đoán tính chất của hafnium và ông khẳng định rằng nguyên tố này không phải là đất hiếm và phải tìm nó trong quặng zirconium.

Sau đó ít lâu, vào năm *1923*, nhà vật lí học Hà Lan là Cofster và nhà vật lí Hungari là Hevesy đã tìm ra nguyên tố này trong thời gian làm việc tại viện Bohr ở Copenhagen Đan Mạch.

Hassium (Hs) Z = 108

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng La tinh *Hassias* có nghĩa là *"bang Hesse"* có thủ đô cổ là Darmstadt.

Lần đầu tiên vào năm 1984, nhóm các nhà vật lí Đức làm việc tại trung tâm nghiên cứu các ion nặng GSI tại Darmstadt đã tổng hợp được nguyên tố 108 bằng phản ứng hạt nhân:



$$^{208}Pb(^{58}Fe, n)\ ^{265}Hs$$

Chu kì bán huỷ dài nhất là 11 phút đối với đồng vị ^{277}Hs.

Helium (heli, He) Z = 2

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Hy Lạp *helios* là *"mặt trời"*. Nguyên tố được tìm thấy khi nghiên cứu quang phổ của những tia sáng mặt trời của nhà thiên văn học người Pháp là Janssen vào năm *1868*.

Độc lập với phát hiện trên và gần như đồng thời, nhà thiên văn học người Anh là Lockyer cũng phát hiện ra nguyên tố này và đặt tên là helium.

Người ta nghĩ rằng helium chỉ có trên mặt trời cho đến khi nhà hoá học người Scotlen là Ramsay phát hiện ra rằng trong quặng uranium cũng có helium.

Về sau người ta đã xác định được rằng helium có mặt trong mọi khoáng sản phóng xạ và cả trong các khí tự nhiên.

Holmium (honmi, Ho) Z = 67

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng La tinh *holmia* có nghĩa là *"Stockholm"*. Nguyên tố được phát hiện vào năm *1878* bởi nhà hoá học Thuỵ Sĩ là L.Soret trong đất erbia và ông gọi là nguyên tố X.

Sau đó, vào năm 1879, độc lập với Soret, nhà hoá học Thuỵ Điển là Cleve cũng phát hiện ra nguyên tố đó.

Đến năm *1911*, lần đầu tiên Homberg đã tách ra được và đề nghị đặt tên là holmium để ghi nhận công lao khám phá của Cleve là công dân của Stockholm ; cũng có thể là ông muốn ghi tên mình vào lịch sử.

Hydrogen (hiđro, H) Z = 1

Tên nguyên tố xuất phát từ chữ Hy Lạp *hydro* là "nước" và chữ *gene* là "sinh ra" bởi vì khi đốt khí này trong không khí thì tạo thành nước.

Nguyên tố hiđro được nhà vật lí người Anh là Cavendish phát hiện ra năm *1766*.

Indium (inđi, In) Z = 49

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ chữ *indigo* có nghĩa là *"xanh chàm"* là màu của vạch quang phổ của nguyên tố đó.

Nguyên tố indium được nhà vật lí người Đức là Reich và nhà luyện kim cũng người Đức là Richter phát hiện ra năm *1863* khi nghiên cứu quặng kẽm sunfua.

Đến năm 1867, hai ông đã cô lập được nguyên tố đó.

Iodine (iot, I) Z = 53

Tên nguyên tố bắt nguồn từ tiếng Hy Lạp *iodes* nghĩa là *"màu tím"* bởi vì hơi nguyên tố này có màu tím.

Năm 1911, nhà hoá học người Pháp là Courtois (Cuốc toa) phát hiện ra nguyên tố này trong rong biển. Năm 1913 nhà hoá học Anh là Davy gọi nó là iodine, về sau nhà hoá học Pháp là Gay Lussac đặt tên là iode và chứng minh nó là một nguyên tố hoá học vào năm 1814.

Mặc dầu cả Davy và Gay Lussac đều có tư cách đòi quyền phát minh nhưng cả hai ông đều thừa nhận công lao tìm ra nguyên tố thuộc về Courtois.

Iridium (iriđi, Ir) Z = 77

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng La tinh *iris* là "thần cầu vồng" do "dung dịch muối của nguyên tố đó có màu sắc rất đa dạng".

Cả hai nguyên tố iridium và osmium đều được tìm thấy ở quặng platin vào năm 1803 do nhà hoá học người Anh là Tennant.

Iron (sắt, Fe) Z = 26

Sắt đã được biết từ thời tiền sử vào khoảng *5000* năm trước công nguyên. Người ta biết rèn sắt thành công cụ và vũ khí mở ra thời đại đồ sắt vào khoảng 1200 năm trước Công nguyên.

Tên nguyên tố có xuất xứ từ tiếng Anglo – Saxon nhưng không rõ nguồn gốc ; còn kí hiệu Fe xuất phát từ tiếng La tinh *ferum* là "bền vững".

Krypton (kripton, Kr) Z = 36

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Hy Lạp *kryptos* có nghĩa là *"che dấu"*.

Nguyên tố nay được tìm thấy trong không khí lỏng bởi nhà hoá học người Scotlen là Ramsay và nhà hoá học người Anh là Travers vào năm *1898*.

Lanthanum (lantan, La) Z = 57

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Hy Lạp *lanthanein* có nghĩa là *"ẩn náu"* bởi vì nó lẫn trong quặng cerium và rất khó tách ra khỏi quặng đất hiếm này.

Năm *1839*, nhà hoá học Thuỵ điển là Mosander đã phát hiện ra nguyên tố này. Đến năm *1842* cũng chính ông đã tách mẫu lanthanium thành hai oxit ; ông giữ lại tên lanthanium đối với một oxit, còn chất kia ông gọi là didimium (có nghĩa là anh em sinh đôi).

Lawrencium (Lr) Z = 103

Thoạt đầu, người ta kí hiệu nguyên tố là Lw nhưng về sau lại đổi chữ "w" thành chư "r" bởi vì chữ W ít thông dụng đối với ngôn ngữ của nhiều nước, và lại chữ W cũng khó đọc hơn.

Người ta đặt tên nguyên tố như vậy để tôn vinh nhà vật lí người Mĩ là "Ernešt. O. Lawrence", người đã có công phát triển máy gia tốc cyclotron.

Bản quyền tổng hợp ra nguyên tố này vào năm *1961* thuộc về các nhà khoa học Mĩ làm việc tại phòng thí nghiệm Berkeley, California dưới sự điều khiển của A. Ghiorso và các nhà khoa học thuộc Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân Dubna (Nga) dưới sự điều khiển của viện sĩ Flerov, sau cả một thập kỉ tranh cãi.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị $^{26?}$Lr là 3,6 giờ.

Lead (chì, Pb) Z = 82

Chì được biết đến từ khoảng *9000* năm trước. Trong ngôi đền Osiris (Ai Cập) còn lưu giữ một pho tượng nhỏ bằng chì được chế tác vào khoảng 3800 năm trước Công nguyên.

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Anglo – Saxon *"lead"* nhưng không rõ nguồn gốc. Kí hiệu của chì xuất phát từ chữ La tinh *plumbum* có nghĩa là "chì".

Lithium (liti, Li) Z = 3

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng La tinh *lithos* có nghĩa là *"đá"* vì lúc bấy giờ người ta nghĩ rằng lithium chỉ tồn tại trong khoáng sản.

Nguyên tố này được nhà khoáng vật học người Thuỵ Điển là Arfvedson (Afơetsơn) tìm ra năm *1817* trong quặng petalit $LiAl(Si_2O_5)_2$.

Đến năm *1855* hai nhà hoá học người Đức là Bunsen và Mattiessen mới cô lập được nó.

Lutetium (Lu) Z = 71

Ban đầu, nguyên tố có tên là "lutecium", nhưng đến năm 1949 IUPAC mới đổi chữ "c" thành chữ "t" bởi vì theo tiếng La tinh cổ thì *"lutetia"* là tên của thành phố *"Paris"*, còn "lutece" là tên của nước Pháp.

Bản quyền tìm ra nguyên tố thuộc về nhà hoá học Pháp Urbain vào năm *1907* mặc dầu nhà hoá học Áo là Welsbach (Vensbách) đã tách được nguyên tố này từ một mẫu ytterbium sớm hơn Urbain. Welsbach đặt tên nguyên tố là "cassiopeicum" ứng với với chòm sao "Cassiopeia". Tuy bài báo của nhà hoá học Áo được công bố sớm hơn bài của nhà hoá học Pháp nhưng Urbain lại gửi bài đến ban biên tập báo sớm hơn.

Hiệp hội trọng lượng nguyên tử quốc tế công nhận quyền phát minh thuộc về Urbain và công nhận tên nguyên tố do ông đề nghị.

Hiệp hội trọng lượng nguyên tử Đức lại công nhận Welsbach và tên nguyên tố cassioperium được dùng ở Đức trong suốt 40 năm sau đó.

Đến năm 1949, IUPAC chính thức công nhận quyền phát minh thuộc về cả hai người và công nhận tên lutetium dựa vào sự thông dụng của tên này và từ đó mới chấm dứt việc tranh chấp.

Magnesium (magie, Mg) Z = 12

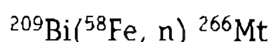
Thoạt đầu, nguyên tố có tên là magnium, về sau đổi thành magnesium xuất xứ từ tên quận *Magnesia* thuộc Tây bắc Hy Lạp.

Từ năm *1755* nhà hoá học Scolen là Black đã phát hiện ra nó nhưng mãi đến năm *1808* nhà hoá học Anh là Davy mới thu được magnesium thô và 23 năm sau, năm *1831* nhà hoá học Pháp Bussy mới tách được magnesium ở trạng thái nguyên chất.

Meitnerium (Mt) Z = 109

Người ta đặt tên nguyên tố như trên để vinh danh nhà nữ vật lí học *Lise Meitner* người Đức với công trình tìm ra nguyên tố protactinium.

Nguyên tố 109 lần đầu tiên được các nhà vật lí tại viện nghiên cứu ion nặng Darmstadt dưới sự điều khiển của G.Münzenber tổng hợp được vào năm *1982*. Nhóm các nhà khoa học đã dùng phản ứng hạt nhân sau :



$$^{209}Bi(^{58}Fe, n)\ ^{266}Mt$$

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{268}Mt là 0,07 giây.

Mendelevium (Md) Z = 101

Thoạt đầu, nguyên tố có kí hiệu là My nhưng đến năm 1955 được đổi thành Md.

Người ta đặt tên nguyên tố là Mendelevium để ghi nhớ công ơn nhà hoá học Nga là "D.Mendeleev" người đã sáng tạo và phát triển hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học.

Công lao tổng hợp ra nguyên tố này thuộc nhóm nhà khoa học Mĩ làm việc tại phòng thí nghiệm Berkeley, California, dưới sự lãnh đạo tài ba của T.Seaborg vào năm 1958.

Nguyên tố 101 được tạo thành qua phản ứng hạt nhân $^{253}Es\ (^{4}He,\ 2n)^{255}Md$ và phản ứng hạt nhân $^{253}Es\ (^{4}He,\ n)^{256}Md$.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{258}Md là 51 ngày.

Mercury (thuỷ ngân, Hg) Z = 80

Người Trung Hoa và Ấn Độ thời cổ đã biết thuỷ ngân vào khoảng *2000* năm trước Công nguyên và người ta tìm thấy trong các ngôi mộ cổ Ai Cập vào khoảng 1500 năm trước Công nguyên.

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tên vị thần "*Mercury*" của người La Mã; vị thần đó là một tín sứ linh lợi của các thần linh.

Kí hiệu hoá học Hg xuất phát từ tiếng Hy Lạp *hydrargyrum* có nghĩa là "*bạc lỏng*".

Molybdenum (molipđen, Mo) Z = 42

Tên ban đầu của nguyên tố này là molybdaenum, về sau đổi thành molybdenum vì trong các ngôn ngữ thông dụng (như Anh, Mĩ, Pháp ...) người ta dùng "e" chứ không phải là"ae".

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng Hy Lạp *molybdos* có nghĩa là "chì". Người cổ xưa dùng từ "chì" để chỉ bất kì khoáng vật nào có màu đen và để lại một vạch màu đen khi vạch trên giấy.

Nguyên tố này được nhà hoá học Thuỵ Điển là Scheele tìm ra năm *1778* nhưng đến năm *1781* mới được nhà hoá học Thuỵ Điển khác là Hjelm tách ra ở dạng nguyên chất.

Neodymium (neođim, Nd) Z = 60

Tên nguyên tố ban đầu là neodidymium, về sau rút ngắn lại là neodymium, có nguồn gốc từ tiếng Hy Lạp *neos là "mới"* và *didymos* là *"cặp song sinh"*.

Nguyên tố này được nhà hoá học Thuỵ Điển là Mosander tìm ra năm *1841* và ông gọi là didymium (hay cặp song sinh) bởi vì nó tương tự với nguyên tố lanthanium do chính ông tìm ra trước đó hai năm.

Đến năm *1885*, nhà hoá học người Áo là Welsbach tách Didymium thành hai nguyên tố ; ông gọi một trong hai nguyên tố đó là neodymium (hay cặp song sinh mới).

Neon (Ne) Z = 10

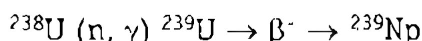
Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Hy Lạp *neos* là *"mới"*.

Nó được tìm ra do nhà hoá học Scotlen là Ramsay và nhà hoá học Anh Travers vào năm *1898*, khi quan sát thấy một vạch quang phổ có màu đỏ chói (khi nghiên cứu quang phổ của một mẫu không khí lỏng).

Neptunium (Np) Z = 93

Nguyên tố được đặt theo tên hành tinh *"Neptune"* (sao Hải vương) là thần biển của người La Mã, vì nó nằm phía ngoài tiếp sau sao Thiên Vương (Uranus) trong Thái dương hệ và trong bảng tuần hoàn thì nó nằm sát ngay sau nguyên tố uranium.

Lần đầu tiên nguyên tố 93 được tổng hợp bởi Mc. Millan và H.Abelson vào năm *1940* thông qua phản ứng hạt nhân :



$$^{238}U\ (n, \gamma)\ ^{239}U \rightarrow \beta^- \rightarrow\ ^{239}Np$$

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{237}Np là 2,14 triệu năm.

Nickel (niken, Ni) Z = 28

Tên nguyên tố bắt nguồn từ tiếng Đức *kupfer nickel* là *"con quỷ dối trá"* do những người thợ mỏ gọi quặng niccolite (NiAs) là "đồng giả" bởi vì bề ngoài quặng này rất giống quặng đồng nhưng trong đó lại không có đồng.

Nguyên tố này được nhà luyện kim Thuỵ Điển là Cronstedt tìm ra năm *1751*.

Niobium (Nb) Z = 41

Người ta đặt tên nguyên tố 41 là niobium để nhớ tới nữ thần *"Niobe"* là con gái của thần *Tantalus* trong thần thoại Hy Lạp. Sở dĩ như vậy vì ban đầu người ta nghĩ rằng niobium và tantalum chỉ là một nguyên tố.

Năm 1801, nhà hoá học kiêm công nghiệp người Anh là Hatchett, tìm thấy nguyên tố này trong khoáng sản columbite có màu đen lấy từ nước Mĩ và ông đặt tên là columbium.

Một năm sau, năm 1802, người ta tìm ra tantalum.

Năm 1809, nhà hoá học Anh là Wollaston cho rằng các nguyên tố columbium và tantalum chỉ là một.

Bốn mươi năm sau, năm 1846, nhà hoá học Đức là Heinrich Rose, từ việc nghiên cứu axit của chúng, xác định rằng columbium và tantalum là hai nguyên tố. Ông đổi tên columbium thành niobium vì rất khó phân biệt nó với "người cha" là tantalum (thần Tantalus).

Cuối cùng, đến năm 1866, nhà hoá học Thuỵ Sĩ là Marignac mới tách được hai nguyên tố này.

Trong hơn một thế kỉ, người Mĩ gọi nguyên tố 41 là columbium và ở châu Âu, người ta gọi là niobium, cho đến năm 1949 IUPAC quyết định gọi là niobium do tên gọi này thông dụng hơn.

Nitrogen (nitơ, N) Z = 7

Lịch sử tìm ra nguyên tố số 7 gắn liền với tên tuổi của 5 nhà bác học " Daniel Rutherford, Priestly, Scheele, Lavoisier và Cavendish.

Vì khí này không duy trì sự sống nên Lavoisier đặt tên là azote, theo tiếng Hy Lạp "a" là không, "Zoe" là sự sống.

Về sau, khi Cavendishe xác định được rằng azote có trong thành phần của diêm tiêu (KNO_3) vào năm *1789,* người ta đặt thêm tên La tinh nitrogenium cho azote do chữ "*nitrum*" là diêm tiêu và chữ "*gene*" là sinh ra.

Nobelium (No) Z = 102

Người ta đặt tên nguyên tố là nobelium để ghi nhớ công ơn của nhà hoá học và công nghiệp Thuỵ Điển là "Alfred Nobel", người đã phát minh ra thuốc nổ dynamit và là nhà sáng lập ra giải Nobel.

Lần đầu tiên, các nhà khoa học Nga làm việc tại Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân Dubna dưới sự chỉ đạo của viện sĩ Flerov đã tổng hợp được nguyên tố 102 và đặt tên là Nobelium.

Thật ra thì từ năm 1957, viện Dubna đã công bố việc tổng hợp được nguyên tố này nhưng về sau, người ta phát hiện ra là công trình đó có những sai sót, tuy nhiên tên nobelium vẫn được giữ lại vì đã được giới khoa học sử dụng rộng rãi.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{259}No là 58 phút.

Osmium (osimi, Os) Z = 76

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Hy Lạp *osme* là *"mùi thối"* vì oxit bay hơi của nó có mùi hắc khó ngửi.

Cả hai nguyên tố osmium và iridium đều lần lượt được tìm ra trong quặng platin do nhà hoá học người Anh là Tennant vào năm *1803*.

Oxygen (oxi, O) Z - 8

Tên nguyên tố bắt nguồn từ tiếng Hy Lạp *oxy* nghĩa là *"axit"* và *genes* nghĩa là *"tạo thành"* bởi vì ban đầu nhà hoá học người Pháp là Lavoisier cho rằng oxygen là chất tạo ra axit do khi đốt photpho và lưu huỳnh rồi hoà tan sản phẩm vào nước thì được dung dịch axit.

Nguyên tố oxygen được nhà hoá học Thuỵ Điển là Scheele tìm ra năm *1771* và độc lập với ông, nhà hoá học người Anh (kiêm thày tu) là Priestly tìm ra năm *1774*.

Tuy nhiên, bản "luận văn về không khí và lửa" (trong đó đề cập đến việc phát hiện ra oxygene) của Scheele mãi đến năm 1777 mới được ấn hành, do đó bản quyền phát minh ra oxygen thuộc về Priestly do công trình của ông được công bố đầu tiên.

Palladium (Pd) Z = 46

Tên nguyên tố được đặt ra để kỉ niệm tiểu hành tinh *Pallas* trong hệ mặt trời (Pallas là tên *thần Trí tuệ và Nghệ thuật của người Hy Lạp)*.

Nguyên tố palladium được nhà vật lí học và hoá học người Anh là Wollaston tìm ra năm *1803*, một năm sau khi nhà thiên văn học người Đức là Olbers tìm ra sao Pallas vào năm 1802.

Công trình tìm ra palladium ban đầu được Wollastoni công bố (nhưng dấu tên) để lấy bản quyền nhưng không tiết lộ một chi tiết nào về việc điều chế ra nguyên tố đó.

Phosphorus (photpho, P) Z = 15

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Hy Lạp *phosphoros* là *"chất phát sáng"* do photpho trắng tự oxi hoá (và nếu chia nhỏ thì bùng cháy) trong không khí và phát sáng trong bóng tối.

Đó cũng là tên cổ của *Sao Vệ Nữ*, xuất hiện trên bầu trời trước lúc bình minh.

Nguyên tố phosphorus được một lái buôn người Đức là Brand, tình cờ tìm ra vào năm *1669*.

Platinum (Pt) Z = 78

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng Tây Ban Nha *platina* có nghĩa là *"bạc"*.

Năm *1735*, nhà toán học người Tây Ban Nha là Ulloa tìm thấy platin ở Peru, Nam Mĩ.

Năm 1741, nhà luyện kim người Anh là Wood tìm thấy platin ở Columbia, Nam Mĩ.

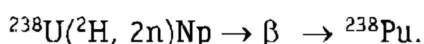
Năm *1750*, nhà vật lí học người Anh là Brownrigg đã điều chế và tinh chế được kim loại platin nguyên chất.

Plutonium (Pu) Z = 94

Người ta đặt tên plutonium để kỉ niệm sao *Pluto* (*Diêm Vương tinh*), vị thần của người La Mã cai quản âm phủ.

Người ta chọn tên Pluto vì trong Thái dương hệ nó là hành tinh ở sát bên ngoài Hải Vương tinh; còn trong hệ thống tuần hoàn nguyên tố plutonium nằm kế tiếp ngay sau nguyên tố neptunium.

Nguyên tố plutonium được tổng hợp lần đầu tiên vào năm *1940* do nhóm các nhà hoá học Mĩ là Seaborg, Mc Millan, W. Kennedy và C.Wahl thông qua phản ứng hạt nhân.



$$^{238}U(^{2}H, 2n)Np \rightarrow \beta \rightarrow {}^{238}Pu.$$

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{244}Pu là 80 triệu năm.

Polonium (Po) Z = 84

Nguyên tố này còn có tên là radium-F.

Người ta đặt tên *polonium* để vinh danh đất nước *Balan "Poland"*, tổ quốc của bà Marie Curie.

Nguyên tố polonium được ông bà Pierre và Marie Curie tìm ra năm *1898* khi nghiên cứu tính phóng xạ của nó.

Độc lập với ông bà Curie, năm 1902 nhà hoá học Đức là Mackwald cũng tìm ra nguyên tố này và đặt tên là radio tellurium.

Chu kì bán huỷ của đồng vị ^{209}Po là 102 năm.

Potassium (kali, K) Z = 19

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Anh *"potash"* là bồ tạt vì nó được tìm ra từ bồ tạt ăn da (KOH).

Kí hiệu hoá học K bắt nguồn từ tiếng La tinh *kalium* mà tiếng này lại có nguồn gốc từ tiếng Á Rập *gali* là kiềm.

Lần đầu tiên nhà hoá học Anh là Davy đã tách được kalium bằng cách điện phân KOH vào năm *1807*.

Praseodymium (prazeođim, Pr) Z = 59

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng Hy Lạp *prasios* là *"màu lục"* và *điymos* là *"Cặp song sinh"* vì muối của nó có màu lục nhạt.

Nguyên tố praseodym được nhà hoá học người áo là Welsbach tìm ra năm *1885* khi ông tách nguyên tố này từ một mẫu didymium. Trước đó, người ta cho rằng didymium là một nguyên tố riêng biệt.

Promethium (prometi, Pm) Z = 61

Tên promethium được đặt ra để nhớ ơn thần *"Prometheus"* vị thần đã ăn trộm lửa của Trời cho loài người và bị Trời trừng phạt một cách thảm thương. Tên thần prometi cũng gợi lên nỗi khó khăn gian khổ trên con đường tìm ra nguyên tố này.

Năm 1926, trường đại học Illinois ở Mĩ công bố đã tìm ra nguyên tố này và đặt tên là illinium.

Năm 1924, các nhà khoa học Italia công bố là đã tìm ra nguyên tố 61 nhưng bản thảo của công trình được bí mật bỏ vào một phong bì niêm phong và đặt tên là Florentium.

Cả hai công trình đều cho rằng nguyên tố 61 được tìm thấy trong khoáng sản tự nhiên. Về sau, người ta chứng tỏ được rằng nguyên tố này không tồn tại trong tự nhiên và các công trình trên bị bác bỏ.

Năm, *1941*, tại trường đại học Ohio nước Mĩ. Các nhà khoa học dùng notron, đotron và các hạt α bắn phá neodym và praseodym thì tạo ra được một số hạt nhân của nguyên tố 61 nhưng không thể chứng minh về mặt hoá học sự tồn tại của nguyên tố này vì thời đó người ta không thể tách riêng các nguyên tố đất hiếm.

Cho đến năm *1947*, lần đầu tiên nguyên tố 61 được tổng hợp trong các sản phẩm được tạo thành khi ^{235}U phân rã dưới tác dụng của các notron tại phòng thí nghiệm Clinton bởi nhóm các nhà khoa học Mĩ là Marinsky, Glendenin và Cryell ; các nhà khoa học trên đã tách được promethium bằng phương pháp trao đổi ion.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{145}Pm là 17,7 năm.

Protactinium (Pa) Z = 91

Đầu tiên, nguyên tố tên là prototactinium nhưng đến năm 1949, IUPAC mới quyết định rút ngắn lại thành tên ngày nay.

Tên nguyên tố có xuất xứ từ chữ Hy Lạp *protos* có nghĩa là *"thứ nhất"* và chữ *actinium* bởi vì người ta thấy nguyên tố này là bà con của nguyên tố actinium.

Một đồng vị của protactinium là ^{234}Pa lần đầu tiên được hai nhà hoá học người Đức là Fajans và Gohring nhận biết được vào năm 1913. Các ông đặt tên nó là "Brevium" (có nghĩa là ngắn ngủi) do có chu kì bán huỷ ngắn.

Đồng vị có chu kì bán huỷ dài nhất là ^{231}Pa do nhà hoá học người Đức là Otto Hahn và nhà vật lí người áo là Lise Meitner nhận biết được năm 1918 trong khi Hahn đang thực hiện nghĩa vụ quân sự ở xa.

Đến năm 1927, nhà hoá học Đức là Grosse lần đầu tiên đã tách ra được.

Tên Protactinium được chấp nhận để gọi nguyên tố mà đại diện là đồng vị ^{231}Pa có chu kì bán huỷ lâu nhất là 32,5 nghìn năm.

Radium (Ra) Z = 88

Tên radium xuất phát từ tiếng La tinh *radius* có nghĩa là *"tia"* vì nó có khả năng phóng ra những tia cực mạnh.

Nguyên tố radium được ông bà Pierre Curie và Marie Curie tìm ra năm *1898*. Ông là nhà vật lí học người Pháp và bà là nhà hoá học Pháp sinh trưởng ở Ba Lan.

Độc lập với ông bà Curie, hai nhà hoá học Anh là Soddy và Cranston cũng tìm ra nguyên tố này.

Đến năm 1910, bà Curie và nhà hoá học Pháp là Debierne đã tách ra được radium.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{226}Ra là 1599 năm.

Radon (Rn) Z = 86

Tên radon có ngụ ý là nó bắt nguồn từ *"radium"*.

Ban đầu nó có tên là emanation (có nghĩa là phát xạ) và kí hiệu hoá học là Em bởi vì nó là sản phẩm phóng xạ của radium.

Về sau Ramsay đề nghị gọi nó là "niton" với kí hiệu hoá học là Nt do tiếng La tinh niton có nghĩa sáng chói.

Cuối cùng, đến năm 1923, người ta đổi thành radon.

Nguyên tố radon được nhà hoá học người Đức là Dorn phát hiện vào năm *1900* và đến năm *1910*, nhà hoá học Scotlen là Ramsay và nhà hoá học Anh là Gray mới cô lập được nó.

Chu kì bán huỷ dài nhất là 3,8 ngày đối với đồng vị ^{222}Rn.

Rhenium (reni, Re) Z = 75

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng La tinh *"rhenus"* là sông *Rhine* (sông Ranh) ở nước Đức.

Năm *1925* các nhà hoá học Đức là Noddack, Tacke và Berg đã dùng quang phổ tia X để tìm ra nó.

Rhodium (Rh) Z = 45

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Hy Lạp *"rhodon"* là *"màu hồng"* vì dung dịch của các muối của nó đều có màu hồng.

Nguyên tố rhodium được nhà hoá học và vật lí học người Anh là Wollaston tìm ra năm *1803* trong quặng platin.

Rubidium (rođi, Rb) Z = 37

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng La tinh *"rubidus"* có nghĩa là *"màu đỏ thẫm"* vì trong quang phổ của nó có hai "vạch đỏ thẫm".

Năm 1861, nhà hoá học Đức là Bunsen và nhà vật lí học cũng người Đức là Kirchhoff phát hiện ra trong khoáng sản lepidolite.

Về sau, Hervesey mới tách được kim loại rubidium nguyên chất.

Ruthenium (ruteni, Ru) Z = 44

Tên nguyên tố bắt nguồn từ tiếng La tinh *"ruthenia"* là "tên cổ của *nước Nga*".

Năm 1828, nhà hoá học người Nga là Osann đã tìm ra nguyên tố này trong quặng platin – thoạt đầu ông nghĩ rằng trong quặng platon thô đó, ông đã tìm ra ba kim loại mới là ruthenium, pluranium và polinium. Về sau, chính ông phủ nhận công bố trên.

Năm 1844, nhà hoá học Nga là Klaus đã chứng tỏ được rằng lầm lẫn của Osann là do mẫu ông dùng không tinh khiết, tuy nhiên Klaus vẫn giữ tên cũ do Osann đề nghị là ruthenium khi ông tách ra được kim loại ruthenium nguyên chất.

Rutherfordium (Rf) Z = 104

Tên nguyên tố 104 được đặt như trên để vinh danh nhà vật lí học người Anh là *Ernest Rutherford*, người được tặng giải Nobel do có công phát triển lí thuyết biến đổi phóng xạ.

Bản quyền phát minh được trao cho các nhà khoa học Mĩ làm việc tại phòng thí nghiệm Berkeley thuộc trường đại học California dưới sự điều khiển của A. Ghioso và các nhà khoa học Nga thuộc Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân Dubna (Nga) dưới sự chỉ đạo của Flerov.

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{263}Rf là 10 phút.

Samarium (Sm) Z - 62

Tên nguyên tố bắt nguồn từ tên quặng *"samarskite"*, trong đó người ta tìm ra nguyên tố số 62 ; đồng thời cũng để kỉ niệm một sĩ quan kĩ sư mỏ người Nga là *"Samarskite"*.

Vào năm *1878*, nhà hoá học Thuỵ Sĩ Delafontaine là người đầu tiên phát hiện ra nguyên tố này và ông đặt tên là decipium. Nhà hoá học Pháp là Lecoq de Boisbaudran cũng tìm ra nguyên tố này vào năm *1879*.

Đến năm 1881. Delafontaine xác định được rằng nguyên tố decipium có thể tách thành hai nguyên tố và một trong hai nguyên tố đó chính là samarium do Boisbaudran tìm ra.

Đến năm 1901, nhà hoá học Demarcay người Pháp đã chỉ ra rằng trong mẫu samarium nói trên còn chứa cả europium.

Scandium (Sc) Z = 21

Tên nguyên tố có xuất xứ từ tiếng La tinh *"Scandia"* có nghĩa là bán đảo *"Scandinavia"*, nơi tìm thấy khoáng sản chứa nguyên tố đó.

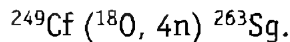
Nhà hoá học Thuỵ điển Nilson đã tìm ra nguyên tố scandium vào năm *1879* từ một mẫu ytterbium.

Cùng năm đó, nhà hoá học Thuỵ Điển Cleve đã chứng tỏ được rằng nguyên tố scandi chính là nguyên tố *"ekabo"* mà trước đây Mendeleep đã tiên đoán các tính chất và xác định vị trí của nó trong hệ thống tuần hoàn.

Seaborgium (Sg) Z = 106

Người ta đặt tên nguyên tố như trên để vinh danh nhà hoá học Mĩ là *Seaborg*, người lãnh đạo tài ba một đội ngũ các nhà khoa học Mĩ, đã tổng hợp được hàng loạt các nguyên tố siêu uran.

Nguyên tố seaborgium lần đầu tiên được tổng hợp bởi các nhà khoa học Mĩ tại phòng thí nghiệm Berkeley thuộc trường đại học California dưới sự chỉ đạo của A. Ghiorso thông qua phản ứng hạt nhân :



$$^{249}Cf\ (^{18}O,\ 4n)\ ^{263}Sg.$$

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{266}Sg là 21 giây.

Selenium (Sc) Z = 34

Tên nguyên tố có xuất xứ từ tiếng Hy Lạp "Selenne" là tên *thần Mặt Trăng* của người Hy Lạp nguyên do là nguyên tố này được tìm ra bằng con đường hoá học cùng với tellurium (mà Tellus là thần Mặt Đất của người La Mã.)

Nguyên tố selenium được nhà hoá học Thuỵ Điển là Berzelius tìm ra năm *1817* khi ông tìm cách tách tellurium từ một mẫu không tinh khiết.

Silicon (silic, Si) Z = 14

Ban đầu, nguyên tố có tên là "silicium" vì người ta nghĩ rằng nó là một kim loại (các kim loại thường có tên tận cùng bằng tiếp vĩ ngữ "ium"). Về sau, thấy là không đúng nên mới đổi tên thành"silicon"; tên này bắt nguồn từ tiếng La tinh *"silex"* hay *"silicix"* là "đá lửa".

Silicon vô định hình được nhà hoá học Thuỵ Điển là Berzelius tìm ra năm 1824, còn silion tinh thể lần đầu tiên nhà hoá học người Pháp là Deville tách ra được vào năm *1854*.

Silver (bạc, Ag) Z = 47

Tên nguyên tố có xuất xứ từ tiếng Anglo – Saxon "*seolfor*" nhưng không rõ nguồn gốc.

Kí hiệu hoá học Ag bắt nguồn từ tiếng La tinh "*argentum*" và tiếng Phạn "*argumas*" đều có nghĩa là *"sáng ngời"*.

Bạc được biết đến từ khoảng 5000 năm trước Công nguyên, ít lâu sau đồng và vàng.

Sodium (natri, Na) Z = 11

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Anh "*soda*" và tiếng La tinh : "*sodanum*" là *"thuốc chữa bệnh nhức đầu"*.

Kí hiệu hoá học Na bắt nguồn từ tiếng La tinh "*natron*" có nghĩa là '*soda*" theo tiếng Anh.

Nguyen tố sodium được nhà hoá học Anh là Davy tìm ra năm *1807* khi điện phân xút ăn da (NaOH).

Strontium (Sr) Z = 38

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tên một thành phố ở Scotland là *"Strontian"* nơi có mỏ khoáng sản strontianit.

Nguyên tố này được nhà hoá học và vật lí học Scotland là Hope tìm ra năm *1792* khi quan sát ngọn lửa đỏ chói của strontium.

Lần đầu tiên vào năm *1808*, nhà hoá học người Anh là Davy đã cô lập được nó.

Sulfur (lưu huỳnh, S) Z = 16

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng La tinh *"sulfurium"* và từ tiếng Phạn *"sulvere"* nhưng chưa ro nguồn gốc.

Sulfur (lưu huỳnh) được biết tới từ thời tiền sử, cách đây khoảng *4000 năm* và được coi như *"hòn đá cháy được"*. Người ta nghĩ rằng hòn đá này có chứa hiđro và oxi.

Mãi đến năm *1809*, các nhà hoá học người Pháp là GayLussac và Thenard mới chứng tỏ được nó là nguyên tố sulfur.

Tantalum (tantan, Ta) Z = 73

Tantal là tên vị anh hùng trong thần thoại Hy Lạp, do tiết lộ bí mật của các vị thần nên bị trừng phạt một cách thảm khốc. Họ bắt ông phải vĩnh viễn chịu đói, khát, mặc dù ông đứng dưới nước ngập tới cổ nhưng vừa định uống thì nước đã lánh xa mồm; trên đầu ông có những chùm quả chín nhưng khi ông với tay lấy, những cành này lại lệch sang nơi khác.

Tên tantal được chọn để nói lên điều tương tự của các nhà hoá học đầu thế kỉ trước : họ nghiên cứu những dấu hiệu và tính chất của nó nhưng không điều chế được chất đó ở trạng thái tự do. Lịch sử tìm ra tantal có nhiều điểm giống với lịch sử tìm ra niobium. Tantal được nhà hoá học và khoáng vật học người Thuỵ Điển là Ekeberg tìm ra năm *1802*.

Technetium (tecnexi, Tc) Z = 43

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Hy Lạp *"technto*s" nghĩa là *"nhân tạo"*.

Có rất nhiều công bố về việc tìm ra nguyên tố này.

Đầu tiên người ta cho rằng nó đã được tìm thấy trong quặng platin vào năm 1828 và đặt tên là "polinium" nhưng thật ra chỉ là iridium không nguyên chất.

Đến năm 1846, người ta công bố đã tìm thấy nó trong một khoáng vật đặt tên là "ilimenium" nhưng thật ra đó chỉ là niobium không tinh khiết. Năm 1847, người ta công bố tìm ra nguyên tố "pelopium" trong quặng platin nhưng thật ra đó cũng chỉ là niobium thô.

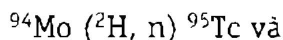
Năm 1877, người ta lại công bố là đã tìm ra nguyên tố 43 và đặt tên là "davyum" để vinh danh nhà hoá học Anh là Davy. Thật ra đó chỉ là hỗn hợp của iridium, rhodium và sắt.

Năm 1896, người ta công bố tìm ra nguyên tố mới và đặt tên là "lucium" nhưng thật ra đó chỉ là yttrium.

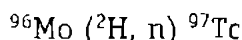
Năm 1909, người ta tách được từ một số khoáng vật một nguyên tố mới và đặt tên là "nipponnium" (nước Nhật la Nippon) nhưng thật ra đó nguyên tố 75 (rhenium) chứ không phải là nguyên tố số 43.

Năm 1925, các nhà khoa học I.Noddak, W.Noddak và Berg công bố tìm ra trong quặng platin một nguyên tố mới đặt tên là "masurium" nhưng không thể nào tách ra được một lượng đáng kể và không thể xác nhận được là đúng.

Cuối cùng, đến năm *1937*, lần đầu tiên hai nhà vật lí người Italia là Perrier và Segre tại trường đại học hoàng gia Palermo đã tổng hợp được nguyên tố này bằng cách dùng deutron bắn phá molybdenum :



$^{94}Mo\ (^{2}H, n)\ ^{95}Tc$ và



$^{96}Mo\ (^{2}H, n)\ ^{97}Tc$

Chu kì bán huỷ dài nhất của đồng vị ^{98}Tc là 6,6 triệu năm.

Tellurium (Te) Z = 52

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng La tinh *"Tellus"* là *"thần Đất"* của người La Mã.

Nguyên tố tellurium được một giám đốc mỏ người Rumani là Reichenstein tìm ra năm 1782 nhưng bị bàn cãi trong suốt 16 năm cho tới khi nhà hoá học Đức là Klaproth lần đầu tiên tách ra được vào năm 1798.

Năm 1789, nhà hoá học người Hunggari, độc lập với các công trình trên, cũng đã tìm ra tellurium, trước Klaproth nhưng sau Reichenstein.

Bản quyền tìm ra tellurium thuộc về Reichenstein.

Terbium (Tb) Z = 65

Tên Terbium có nguồn gốc từ tên *"làng Ytterby"* trên đất Thuỵ Điển, ở đó lần đầu tiên người ta tìm thấy *quặng ytterbit* là nguồn sản xuất ra terbium.

Nguyên tố này được nhà hoá học Thuỵ Điển là Mosander tìm ra năm 1843 trong muối của yttrium. Từ muối này, ông tách ra được ba nguyên tố : ông gọi một nguyên tố là *"yttrium"*; một nguyên tố có muối màu hồng ông gọi là *"terbium"*; một nguyên tô có peroxit màu vàng đậm ông gọi là "erbium".

Nhà hoá học Berlin chỉ tách ra được hai nguyên tố từ yttrium : yttrium và một nguyên tố có oxit màu hồng ông gọi là "erbium".

Đến năm 1862, nhà hoá học Thuỵ Sĩ là Delafontaine xem xét lại yttrium và ông nhận ra peroxit màu vàng. Vì tên 'erbium" đã được gán cho oxit màu hồng nên ban đầu ông gọi nguyên tố có peroxit màu vàng là "mosandrum" để tôn vinh Mosander nhưng về sau ông lại đổi thành "terbium".

Như vậy, tên nguyên khai của erbium và terbium bây giờ chuyển đổi cho nhau.

Vì Bunsen nghiên cứu mẫu erbium của Masander (bây giờ là terbium) bằng phương pháp quang phổ đã phát hiện ra rằng đó chỉ là một hỗn hợp cho nên vấn đề ai thực tế đã tìm ra terbium? (Masander hay De La Fontaine?) cho đến nay vẫn chưa được giải quyết.

Thallium (tali, Tl) Z = 81

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ chữ Hy Lạp *"thallos"* là *"chồi xanh"* vì vạch quang phổ của nó có màu lục.

Nguyên tố thallium được nhà hoá học và vật lí học người Anh là Crookes tìm ra năm *1881*.

Nhà hoá học Pháp là Lamy là người đầu tiên tách ra được kim loại thallium vào năm *1882*.

Thorium (Th) Z = 90

Tên nguyên tố có xuất xứ từ tên thần "Thor", ông *"Thiên lôi"* của người Scandinavơ.

Nó được tìm ra từ khoáng chất thorite ($ThSiO_4$) bởi nhà hoá học Thuỵ Điển vào năm *1828*.

Lần đầu tiên được nhà hoá học Lely và Hamburger tách ra vào năm *1914*.

Thulium (tuli, T) Z = 69

Tên nguyên tố bắt nguồn từ *tên cổ xưa nhất của vùng Seandinave* là "Thule".

Nó được nhà hoá học Thuỵ Điển là Cleve tìm ra trong một mẫu quặng erbium vào năm 1897 và lần đầu tiên được nhà hoá học Mĩ là James tách ra được vào năm 1911.

Tin (thiếc, Sn) Z = 50

Tên nguyên tố xuất phát từ tiếng Anglo-Saxon *"tin"* nhưng không rõ nguồn gốc. Kí hiệu hoá học Sn bắt nguồn từ chữ La tinh *"stanum"* là những hợp kim có chứa chì.

Thiếc được biết đến từ thời tiền sử. Hợp kim thiếc với đồng để tạo ra đồng thiếc và đồng thau dã được sản xuất cách đây khoảng 3500 năm. Đồ mĩ nghệ còn lại cho tới ngày nay được chế tác vào khoảng năm 2000 trước Công nguyên.

Titanium (titan, Ti) Z = 22

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng La tinh *"titans"* là *"trưởng nam của thần Đất"* trong thần thoại.

Ban đầu nguyên tố này được một thày dòng người Anh là Gregor tìm thấy trong quặng ilmenite ($FeTiO_2$) vào năm *1791*. Ông đặt tên nguyên tố là "menachin" vì quặng này có ở giáo xứ Menachan.

Đến năm 1795, một nhà hoá học người Đức cũng tìm ra nguyên tố này và ông đặt tên là *"titanium"* vì nó không có tính chất đặc trưng gì để lấy làm tên nguyên tố.

Kim loại titan lần đầu tiên được hai nhà hoá học Thuỵ Điển là Pettersson và Nilson tách ra được.

Wolfram, Tungsten (vonfam, W) Z = 74

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng Thuỵ Điển *"tung"* là nặng và *"sten"* là "đá".

Kí hiệu hoá học W xuất xứ từ tiếng Đức *"wolfram"* là *"nước bọt chó sói"*. Sở dĩ như vậy vì nó được tìm thấy cùng với thiếc và nó gây trở ngại cho việc nấu chảy thiếc ; người ta ví von là chất này ăn thiếc như chó sói ăn thịt cừu.

Năm 1949, IUPAC chính thức chấp nhận tên khoa học của nguyên tố 74 là "Wolfram", còn tên tungsten được coi là tên thương mại cũng tương tự như việc dùng tên sắt và thép.

Vào khoảng năm 1951, các nhà hoá học muốn loại bỏ tên tungsten nhưng bị cộng đồng quốc tế phản đối nên vẫn giữ cho đến ngày nay.

Nguyên tố tungsten được nhà hoá học Thuỵ Điển là Scheele tìm ra năm 1781 và kim loại tungsten lần đầu tiên được hai anh em nhà hoá học Tây Ban Nha là F. Ethuyar và J. Ethuyar cô lập được vào năm 1783.

Uranium (U) Z = 92

Tên nguyên tố xuất phát từ tên hành tinh *"Uranus"* là *Thiên Vương tinh"*, theo thần thoại La Mã thì vì sao này là thân phụ của "Ngọc hoàng Thượng Đế".

Nguyên tố này được nhà hoá học Đức là Klaproth tìm ra năm *1789,* tám năm sau khi nhà thiên văn học Đức – Anh là Heshel tìm ra hành tinh uranus vào năm 1781.

Đến năm *1841*, nhà hoá học người Pháp là Peligot mới tách ra được urani kim loại.

Vanadium (V) Z = 23

Tên vanadium xuất phát từ tên *"Vanadis"*, thần *"Tình yêu và sắc đẹp"* của người Scandinavơ. Sở dĩ như vậy vì nhiều hợp chất của nguyên tố này có màu sắc rất đẹp.

Nguyên tố này được nhà vật lí học và hoá học người Thuỵ Điển là N. G.Sefstrom tìm ra năm *1830*.

Thật ra, ban đầu nguyên tố này được nhà địa chất người Tây Ban Nha là Fernandez tìm ra năm 1801 và ông đặt tên là "erythronium" là tên một loài cây nở hoa rất đẹp. Tuy nhiên, về sau ông lại phủ nhận và cho đó là crom.

Về sau, người ta chứng tỏ được rằng, trong mẫu chì ông dùng ban đầu có vanadium trong đó.

Đến năm *1869*, nhà hoá học người Anh là Roscoe đã tách được vanadium kim loại.

Xenon (Xe) Z = 54

Tên nguyên tố bắt nguồn từ tiếng Hy Lạp *"Xenon"* có nghĩa là *"Người lạ mặt"*.

Nguyên tố xenon được nhà hoá học người Scotlen là Ramsay và nhà hoá học người Anh là Travers tìm ra năm *1898* trong một mẫu không khí lỏng.

Ytterbium (Yb) Z = 70

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tên làng *"Ytterby"* trên đất Thuỵ Điển, ở đó người ta tìm thấy quặng *ytterbite* (nguồn phát hiện ra ytterbium).

Nhà hoá học Thuỵ Sĩ là Marignac đã tìm ra ytterbium trong nitrate erbium từ quặng gadolinit (gadolinit là một tên khác của ytterbite).

Năm *1907*, nhà hoá học Đức là Welsbach xác định được rằng ytterbium thực ra là hai nguyên tố, ông gọi là "aldebaranium" và "Casseopeium".

Cùng trong thời gian đó và độc lập với nhà hoá học Đức, nhà hoá học Pháp là Urbain thu được hai nguyên tố từ ytterbium và ông đặt tên là "neoyterbiun" và "lutecium".

Tên neoyterbium được Welsbach chấp nhận thay cho tên aldebaranium và về sau rút ngắn lại thành ytterbium.

Năm 1937, lần đầu tiên nguyên tố này được tách ra tinh khiết bởi Klemm và Bonner.

Yttrium (ytri, Y) Z = 39

Ban đầu, tên nguyên tố được Gadolin đặt cho là ytterbium và về sau được Eckberg rút ngắn lại thành yttrium.

Tên nguyên tố bắt nguồn từ tên làng *"Ytterby"* trên đất Thuỵ Điển, ở đó người ta tìm thấy quặng *gadolinite*.

Năm *1794*, nhà hoá học người Phần Lan là Gadolin tìm ra yttrium trong quặng ytterbite, về sau Gadolin đổi tên quặng đó thành gadolinite.

Về sau, một nguyên tố khác mang tên ytterbium do Gadolin đã đề nghị.

Năm *1843*, nhà hoá học Thuỵ Điển Masander đã tách được nguyên tố yttrium.

Zinc (kẽm, Zn) Z = 30

Tên nguyên tố có xuất xứ từ tiếng Đức "*Zink*" nhưng không rõ nguồn gốc.

Kẽm được biết đến từ khoảng *1000 năm trước Công nguyên*. Người ta dùng hợp chất của kẽm để trị các vết thương và làm thuốc đau mắt nhưng công dụng lớn của kẽm là để chế tạo đồng thau.

Kẽm được xác định là một kim loại vào khoảng năm 1374.

Zirconium (ziriconi, Zr) Z = 40

Tên nguyên tố có nguồn gốc từ tiếng A Rập "*rargun*" có nghĩa là "*giống vàng*".

Nguyên tố này được nhà hoá học Đức là Klaproth tìm ra trong quặng Zirconia vào năm *1789*.

Lần đầu tiên, zirconium được nhà hoá học Thuỵ Điển Berzelius tách ra được ở dạng không nguyên chất và cuối cùng các nhà hoá học Lely và Hamburger tách ra ở dạng nguyên chất vào năm 1914.

Những phát hiện chưa được công nhận

Z	Tên nguyên tố	Năm phát hiện	Nhóm các nhà khoa học và nơi phát hiện ra nguyên tố
114	*Ununquadium*	1999	Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân Dubna (Nga)
116	*Ununhexium*	2000	Viện Liên hợp nghiên cứu hạt nhân Dubna (Nga)
118	*Ununoctium*	2002	Viện Hạt nhân Dubna (Nga) và phòng thí nghiệm quốc gia Lawrence Livermore (Mĩ)
113	*Ununtrium*	2003	Viện Hạt nhân Dubna (Nga) và phòng thí nghiệm quốc gia Lawrence Livermore (Mĩ)
115	*Ununpentium*	2003	Viện Hạt nhân Dubna (Nga) và phòng thí nghiệm quốc gia Lawrence Livermore (Mĩ)
122	*Unbibium*	2008	Trường Đại học Hebrew ở Jususalem (Israel) Nhóm các nhà khoa học dưới sự điều khiển của Marinov thông báo là đã tìm thấy những nguyên tử 122 tồn tại tự nhiên (unbibium) trong quặng thorium với nồng độ từ 10^{-11} đến 10^{-12}. Nếu điều đó là chính xác thì nguyên tố 112 là nguyên tố đầu tiên tồn tại trong tự nhiên được tìm ra kể từ khi phát hiện ra *Francium*.

Ghi chú về việc xác định bản quyền tìm ra nguyên tố hoá học và việc đặt tên các nguyên tố

Một số nguyên tố đã biết từ thời Cổ đại (5 nguyên tố là đồng, vàng, chì, bạc, sắt).

Một số nguyên tố được tìm ra trong mấy trăm năm nay.

Một số nguyên tố được tổng hợp từ hơn 50 năm nay thông qua các phản ứng hạt nhân (các nguyên tố siêu uran).

Từ cuối thế kỉ thứ XVIII và đầu thế kỉ XIX, người ta dùng tính chất của các chất mới, việc phân tách, màu sắc của các hợp chất, hình dạng tinh thể, khả năng phản ứng ... làm cơ sở để xác định sự tồn tại của nguyên tố mới.

Trong thời gian đó, trọng lượng nguyên tử cũng như phương pháp phân tích quang phổ cũng chưa được tiếp cận.

Trong thời gian này có rất nhiều công bố về việc tìm ra các nguyên tố đất hiếm. Quyền phát minh thường không thuộc về người đầu tiên tách được nguyên tố ở dạng nguyên chất mà lại thuộc về người đầu tiên đã phát hiện ra quặng của nguyên tố đó, ngay cả khi quặng đó còn là quặng tạp trong đó có chứa nhiều nguyên tố khác.

Vì vậy, người đầu tiên phát hiện và công bố tính chất đặc trưng của nguyên tố, ngày nay thường được coi là người đầu tiên tìm ra nguyên tố.

Do đó, không thể xác định một cách chính xác thời gian tìm ra hầu hết các nguyên tố hoá học.

Về sau này lại có trường hợp vinh quang tìm ra nguyên tố không thuộc về người thực sự tìm ra nguyên tố đầu tiên mà lại thuộc về người đầu tiên công bố phát kiến của mình trên báo chí. Nếu việc in ấn bài báo bị chậm trễ, nhà phát minh thật đành bị thiệt thòi.

Vào nửa sau thế kỉ XIX, có nhiều tranh chấp về bản quyền phát minh do lòng "tự hào dân tộc", các nhà khoa học muốn dành quyền phát minh về phía mình để có quyền đặt tên nguyên tố. Gần đây, một hội nghị liên tịch giữa IUPAC (của các nhà hoá học) và IUPAP[1] (của các nhà vật lí) đã được triệu tập và đã giải quyết ổn thoả một số tranh chấp kéo dài hàng thập kỉ.

Về việc công nhận tên nguyên tố hoá học

Tên của các nguyên tố hoá học phải được cộng đồng các nhà hoá học chấp nhận tuy quyền ưu tiên đề nghị của nhà phát minh cũng được lưu ý.

Tuy nhiên, có những cuộc tranh chấp lâu dài về tên của một số nguyên tố bắt nguồn từ sự cạnh tranh giữa các nhà khoa học thuộc các quốc gia khác nhau, trước đây là giữa các nhà khoa học Pháp và Đức và gần đây là giữa các nhà khoa học Nga và Mĩ.

(1) Hiệp hội Quốc tế Vật lí Lí thuyết và Vật lí Ứng dụng.

Từ đầu thế kỉ XX, Hội quốc tế về trọng lượng nguyên tử (International Committee on Atomic Weight (ICAW) được thành lập. Tuy ICAW không quyết định việc xác nhận về mặt quốc tế tên nguyên tố nhưng tên nguyên tố kèm theo trọng lượng nguyên tử của nó là một bằng chứng bổ sung để cộng đồng xem xét.

Hai mươi năm sau, Hiệp hội quốc tế Hoá học lí thuyết và hoá học ứng dụng (IUPAC) được thành lập và ICAW trở thành một bộ phận của tổ chức này (Từ giữa những năm 1930 và 1950 IUPAC được gọi là Hội hoá học quốc tế).

Đến năm 1949, ICAW chính thức giải tán. Trách nhiệm xác nhận tên các nguyên tố được IUPAC uỷ nhiệm cho Hội đồng danh pháp về hoá học vô cơ (Commission on Nomenclature of Inorganic Chemistry (CNIC) đảm nhận.

CNIC không phủ nhận quyền ưu tiên đề nghị tên nguyên tố mới của nhà phát minh nhưng CNIC đề ra một số cơ sở của việc lựa chọn.

– Tên nguyên tố được chọn càng ít khác biệt càng tốt giữa các ngôn ngữ.

– Dựa trên cơ sở thực tiễn và thông dụng.

(Tư liệu trên chủ yếu dựa vào báo cáo của N.E.Holden (Mĩ) tại Hội nghị lần thứ 41 của IUPAC tại Brisbane, Australia năm 2001, được cập nhật lần cuối vào năm 2004.)

THỨ TỰ THỜI GIAN TÌM RA CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC

1. NHỮNG PHÁT HIỆN TỪ THỜI CỔ KHÔNG CÓ TRONG TÀI LIỆU GHI CHÉP

Tên nguyên tố	Số hiệu nguyên tử (Z)	Được sử dụng sớm nhất từ	Mẫu vật cổ nhất còn lại có niên đại	Nơi tìm ra mẫu vật cổ nhất còn lại
Đồng	29	9000 năm trước Công nguyên	6000 năm trước Công nguyên	Anatilia (Tiểu Á)
Vàng	79	6000 năm trước Công nguyên	5500 năm trước Công nguyên	Ai Cập
Chì	82	7000 năm trước Công nguyên	3800 năm trước Công nguyên	Abydos (Ai Cập)
Bạc	47	5000 năm trước Công nguyên	4000 năm trước Công nguyên	Tiểu Á
Sắt	26	5000 năm trước Công nguyên	4000 năm trước Công nguyên	Ai Cập
Cacbon	6	3750 năm trước Công nguyên	2000 năm trước Công nguyên	

Thiếc	50	3500 năm trước Công nguyên		
Lưu huỳnh	16	2000 năm trước Công nguyên		Trung Quốc, Ấn Độ
Thuỷ ngân	80	1500 năm trước Công nguyên		Ai Cập
Kẽm	30	1000 năm trước Công nguyên	1000 năm trước Công nguyên	Ấn Độ

2. NHỮNG PHÁT HIỆN ĐƯỢC GHI CHÉP

Tên nguyên tố	Z	Năm phát hiện ra nguyên tố	Năm tách nguyên tố ở dạng nguyên chất
Arsenic	33	800 năm sau Công nguyên	800 năm sau Công nguyên
Antimony	51	800	800
Bismuth	83	800	1753
Phosphorus	15	1669	1669
Cobalt	27	1732	?
Platinum	78	1735	1735
Nickel	28	1751	1751
Magnesium	12	1755	1808
Hydrogen	1	1766	1500
Oxygen	8	1771	1771
Nitrogen	7	1772	1772
Chlorme	17	1774	1774
Manganese	25	1770	1774
Barium	56	1772	1808
Molybdenum	42	1778	1781
Tellurium	52	1782	1795
Tungsten	74	1781	1783
Strontium	38	1787	1808
Zirconium	40	1789	1824
Uramium	92	1789	1841
Titanium	22	1791	1825

Yttrium	39	1794	1840
Chromium	24	1797	1798
Beryllium	4	1798	1828
Vanadium	23	1801	1830
Niobium	41	1801	1864
Tantalum	73	1802	?
Palladium	46	1803	1803
Cerium	58	1803	1839
Osmium	76	1803	1803
Iridium	77	1803	1803
Rhodium	45	1804	1804
Potassium	19	1807	1807
Sodium	11	1807	1807
Calcium	20	1808	1808
Boron	5	1808	1808
Iodine	53	1811	1811
Lithium	3	1817	1817
Cadmium	48	1817	1817
Selenium	34	1817	1817
Silicon	14	1824	1824
Aluminium	13	1825	1825
Bromine	35	1825	1825
Thorium	90	1829	?
Lanthanum	57	1838	?
Erbium	68	1842	?
Terbium	65	1842	1842
Ruthenium	44	1807	1807
Caesium	55	1860	1882
Rubidium	37	1861	?
Thallium	81	1861	1862
Indium	49	1863	1867
Helium	2	1868	1895

Gallium	31	1875	?
Ytterbium	70	1878	?
Holmium	67	1878	?
Thulium	69	1879	1879
Scandium	21	1879	1879
Samarium	62	1879	1879
Gadolinium	64	1880	1886
Praseodymium	59	1885	?
Neodymium	60	1885	?
Dysprosium	66	1886	?
Germanium	32	1886	?
Fluorine	9	1886	1886
Argon	18	1894	1894
Krypton	36	1898	1898
Neon	10	1898	1898
Xenon	54	1898	1898
Polonium	84	1898	1902
Radium	88	1898	1902
Radon	86	1898	1901
Actinium	89	1899	1899
Europium	63	1896	1901
Lutetium	71	1906	1906
Rhenium	75	1908	1908
Hafnium	72	1911	1922
Protactinium	91	1913	?
Technetium	43	1937	1937
Francium	87	1939	1939
Astatine	85	1940	?
Neptunium	93	1940	?
Plutonium	94	1940	?
Americium	95	1944	?
Curium	96	1944	?

Promethium	61	1942	1945
Berkelium	97	1949	?
Californium	98	1950	?
Einsteinium	99	1952	1952
Fermium	100	1952	?
Mendelevium	101	1955	?
Nobelium	102	1958	?
Lawrencium	103	1961	?
Rutherfordium	104	1964	?
Dubnium	105	1968	?
Seaborgium	106	1974	?
Bohrium	107	1981	?
Meitnerium	109	1982	?
Hassium	108	1984	?
Darmstadtium	110	1994	?
Roentgenium	111	1994	?
Copernicium (Ununbium)	112	1996	?

3. NHỮNG PHÁT HIỆN CHƯA ĐƯỢC CÔNG NHẬN

Tên nguyên tố	Z	Năm phát hiện ra nguyên tố
Ununquadium	114	1999
Ununhexium	116	2000
Ununoctium	118	2002
Ununtrium	113	2003
Ununpentium	115	2003
Unbibium	122	2008 Nhóm các nhà khoa học trường đại học Jerusalem thông báo đã phát hiện ra các nguyên tử của nguyên tố 122 tồn tại tự nhiên trong quặng thorium

PHẦN TÁM

MỘT SỐ BÀI TẬP TỔNG HỢP, HƯỚNG DẪN TRẢ LỜI CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP

Một số bài tập tổng hợp

1. HỆ THỐNG TUẦN HOÀN TRÊN ĐẤT PHẲNG

1.1. Câu hỏi

Hệ thống tuần hoàn các nguyên tố hoá học trong thế giới ba chiều của chúng ta được dựa trên 4 số lượng tử của electron:

$n = 1, 2, 3, ...$

$l = 0, 1, ..., n - 1$

$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l$

$m_s = \pm \frac{1}{2}$

Giả định rằng ta di cư đến thế giới Đất Phẳng, đó là một thế giới hai chiều. Ở đó, hệ thống tuần hoàn của các nguyên tố dựa trên 3 số lượng tử của electron:

$n = 1, 2, 3, ...$

$m - 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm (n - 1)$

$m_s = \pm \frac{1}{2}$

m đóng vai trò hỗn hợp của l và m_l của thế giới ba chiều (Ví dụ có mối liên hệ giữa các mức s, p, d,... với m).

Những kết quả thực nghiệm về vật lí và hoá học thu được từ thế giới ba chiều được áp dụng đối với thế giới hai chiều.

a) Hãy suy ra bốn chu kì đầu của hệ thống tuần hoàn các nguyên tố trên Đất Phẳng. Dùng số hiệu nguyên tử (Z) làm kí hiệu của các nguyên tố.

Viết cấu hình electron của mỗi nguyên tố.

b) Hãy suy ra các obitan lai hoá của các nguyên tố với n = 2.

- Nguyên tố nào là cơ sở của hoá hữu cơ trên Đất Phẳng (dùng số hiệu nguyên tử làm kí hiệu).
- Hay tìm các chất tương đồng trên Đất Phẳng với etan, eten và xiclohexan trên Quả Đất.
- Loại hợp chất vòng thơm nào có thể có trên Đất Phẳng ?

c) *Trên Đất Phẳng*, quy tắc nào tương ứng với quy tắc "bát tử" trong thế giới ba chiều.

d) *Theo cách biểu diễn bằng đồ thị*, hãy dự đoán chiều hướng biến đổi năng lượng ion hoá thứ nhất của các nguyên tố trên Đất Phẳng có n = 2.

– Biểu diễn bằng đồ thị sự tăng độ âm điện của các nguyên tố trong hệ thống tuần hoàn trên Đất Phẳng.

e) *Vẽ giản đồ năng lượng* của các obitan phân tử của các phân tử trung hoà gồm hai nguyên tử đồng hạch của các nguyên tố có n = 2.

Các phân tử nào bền ở Đất Phẳng?

f) *Xét các hợp chất nhị tố* đơn giản của các nguyên tố có n = 2 với nguyên tố nhẹ nhất (Z = 1).

Suy ra cấu trúc Lewis; dự đoán dạng hình học và nêu lên những tính chất tương đồng với chúng trong thế giới ba chiều.

g) *Xét các nguyên tố có $n \le 3$*

Nêu lên một nguyên tố trong thế giới ba chiều (viết kí hiệu hoá học) tương đồng với mỗi nguyên tố trên Đất Phẳng.

Dựa theo sự tương đồng về tính chất vật lí và hoá học đó, hãy dự đoán những nguyên tố nào trong thế giới hai chiều là rắn, lỏng, khí ở nhiệt độ và áp suất thường.

(Theo đề thi Olympic Quốc tế lần thứ 20 (1988) tại Phần Lan).

1.2. Bài giải

a) *Hệ thống tuần hoàn các nguyên tố trên Đất Phẳng*

(4 chu kì đầu)

1									2
3	4					5	6	7	8
9	10					11	12	13	14
15	16	17	18	19	20	21	22	23	24

– Cấu hình electron của mỗi nguyên tố:

Các mức s, p, d... liên hệ với m như sau:

$m_l = 0, +1, +2, \ldots$

Mức s, p, d, ...

Mỗi giá trị của m nhận 2 giá trị m_s tức là $+\frac{1}{2}$ và $-\frac{1}{2}$.

Những kết quả thực nghiệm về vật lí và hoá học từ thế giới ba chiều áp dụng được cho thế giới hai chiều:

- 1s 2s2p 3s3p 4s3d4p ...

- Chu kì bắt đầu từ nguyên tố có cấu hình electron s^1 và kết thúc bằng nguyên tố có cấu hình p^x bão hoà (ở đây là p^4) (trừ chu kì 1).

- Số lượng tử n ứng với số thứ tự của chu kì

Chu kì										
1	1 $1s^1$									2 $1s^2$
2	3 $[1s^22s^1]$	4 $[1s^22s^2]$					5 $[\ ]2p^1$	6 $[\ ]2p^2$	7 $[\ ]2p^3$	8 $[\ ]2p^4$
3	9 $[\ ]3s^1$	10 $[3s^2]$					11 $[\ ]3p^1$	12 $[\ ]3p^2$	13 $[\ ]3p^3$	14 $[\ ]3p^4$
4	15 $[\ ]4s^1$	16 $[\ ][4s^2]$	17 $[\ ]4s^23d^1$	18 $[\ ]4s^23d^2$	19 $[\ ]4s^23d^3$	20 $[\ ]4s^23d^4$	21 $[\ ]4s^23d^44p^1$	22 $[\ ]4s^23d^44p^2$	23 $[\ ]4s^23d^44p^3$	24 $[\ ]4s^23d^44p^4$

Cấu hình electron của các nguyên tố thuộc 4 chu kì đầu.

b) *Các obitan lai hoá (với n = 2)*

sp^1
thẳng

sp^2
tam giác phẳng

Không có lai hóa sp^3
(tứ diện)

- Cơ sở của hoá hữu cơ trên Trái Đất là nguyên tố 6 (C) thuộc nhóm 4 tức là $\frac{1}{2}$ số nhóm 8.

Vậy nguyên tố của sự sống (hoá hữu cơ) trên Đất Phẳng là nguyên tố số 5 thuộc nhóm 3 tức là $\frac{1}{2}$ số nhóm 6.

- Trái Đất Đất Phẳng

+ C_2H_6 ⇔

```
1       1
 \     /
  5 - 5
 /     \
1       1
```

nguyên tố số 5 chỉ có 3 electron bên ngoài

+ C_2H_4 ⇔ 1 − 5 = 5 − 1

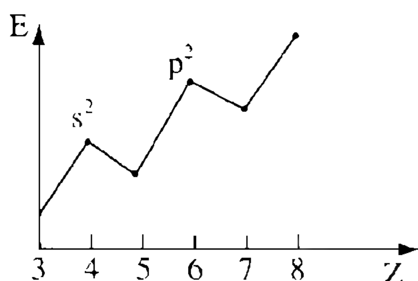
+ C_6H_{12} ⇔

```
     1       1
      \     /
       5 - 5
      /     \
 1 - 5       5 - 1
      \     /
       5 - 5
      /     \
     1       1
```

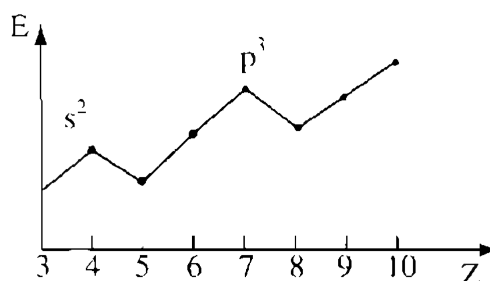
+ Không có hợp chất vòng thơm.

c) *Tương ứng với quy tắc "bát tử"* trên Trái Đất là quy tắc "lục tử" (6 eletron) trên Đất Phẳng.

d) *Chiều biến đổi năng lượng ion hoá thứ nhất của các nguyên tố (n = 2)*

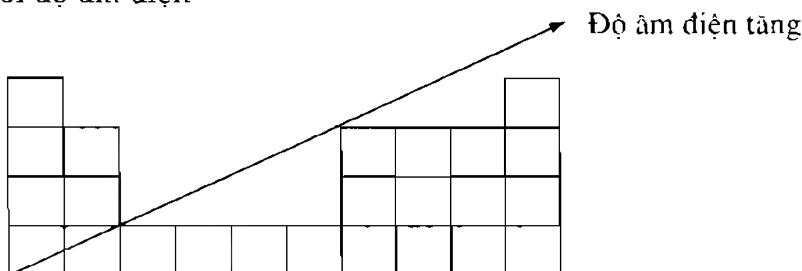


(Thế giới hai chiều)



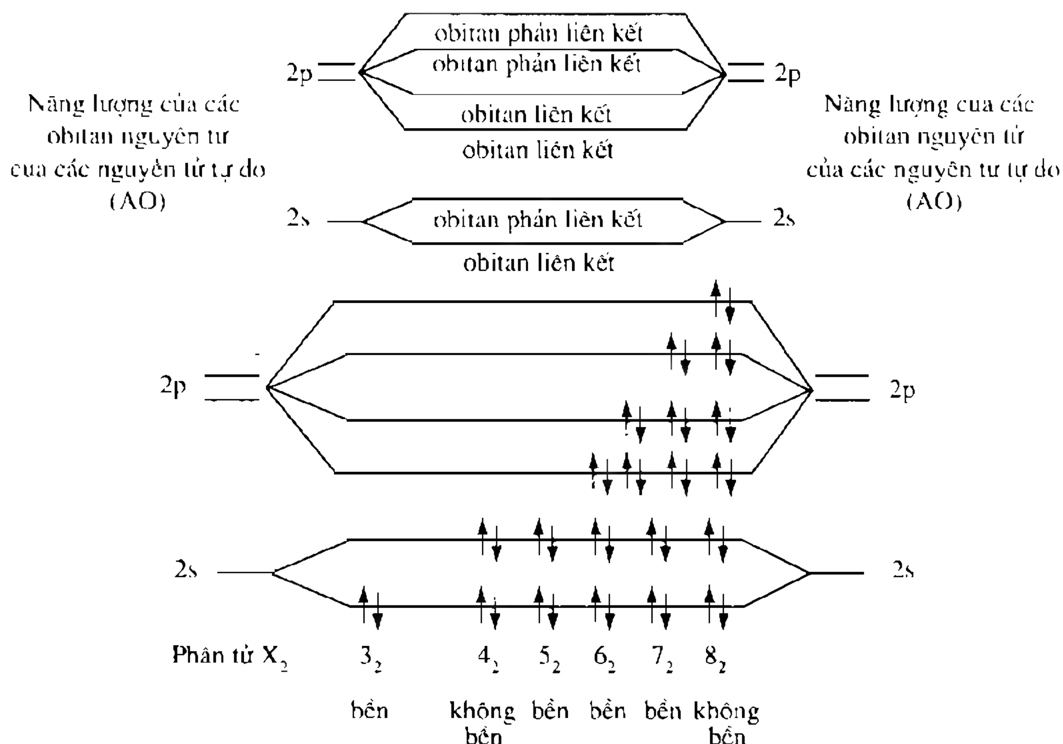
(Thế giới ba chiều)

– Sự biến đổi độ âm điện



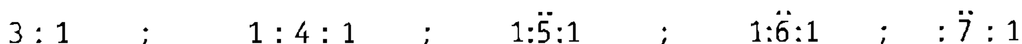
e) *Giản đồ mức năng lượng của các phân tử X_2 đồng hạch của các nguyên tố chu kì 2 (n = 2) trên Đất Phẳng*

Năng lượng của các obitan phân tử (MO)

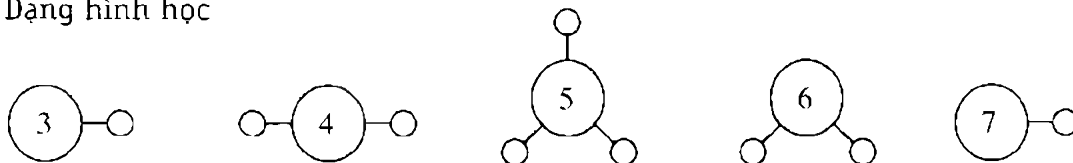


f) *Hợp chất nhị tố của các nguyên tố ở chu kì 2 với nguyên tố có Z = 1*

– *Cấu trúc Lewis:*



– Dạng hình học



– *Tương đồng với các chất trong thế giới 3 chiều sau:*



LiH ; BeH_2 ; BH_3 hay CH_4 ; H_2O hay NH_3 ; HF

g) *Các nguyên tố trong thế giới ba chiều thuộc ba chu kì đầu tương đồng với các nguyên tố thuộc ba chu kì đầu trên Đất Phẳng.*

H					He
Li	Be	B/C	N/O	F	Ne
Na	Mg	Al/Si	P/S	Cl	Ar

Các nguyên tố tương đồng trong thế giới ba chiều

k					k
r	r	r	k	k	k
r	r	r	r	k	k

Trạng thái vật lí của các nguyên tố trong thế giới hai chiều

2. CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN

Hệ thống tuần hoàn được tìm ra để thể hiện sự biến đổi tuần hoàn tính chất của các nguyên tố.

Ngày nay người ta đã biết nhiều kiểu bảng tuần hoàn.

Theo lí thuyết lượng tử, trạng thái của electron trong nguyên tử được xác định bằng 4 số lượng tử là n, l, m_l, m_s, trong đó n là những số nguyên; l = 0, ..., n –1; m_l = –l, –l +1, ..., 0,... + l; $m_s = \pm\frac{1}{2}$. Như vậy có các obitan 1s, 2s2p, 3s3p3d, 4s,...

Các nguyên tố khác nhau được tạo nên khi các electron (và các proton tương ứng) lần lượt lấp đầy các obitan nguyên tử đó.

– Kiểu bảng tuần hoàn phổ biến nhất được trình bày trên hình 1.

– Có kiểu bảng tách các kim loại chuyển tiếp ra khỏi khối các nguyên tố s và p (hình 2).

– Bảng (3), (4) là các kiểu bảng hình xoáy ốc và hình chìa khoá.

2.1. Câu hỏi

1. Dựa vào các số lượng tử n, l, m_l, m_s, điền các nguyên tố khối s (kim loại kiềm và kiềm thổ) và các nguyên tố khối d (các kim loại chuyển tiếp từ Sc → Cu, Y → Ag và Lu → Au) vào các vị trí thích hợp trong hình (3), (4).

2. Dựa vào bảng tuần hoàn, Mendeleep đã tiên đoán sự tồn tại của các nguyên tố Ga, Sc, và Ge.

Trên thực tế, năm 1874, nhà hoá học người Pháp Lecoq de Boisbaudran đã tìm ra nguyên tố Ga.

Ứng dụng gần đây nhất của Ga là để sản xuất chất bán dẫn Ga – As dùng chế tạo con chip của máy tính có tốc độ cao, tạo ra tia laze cực mạnh và làm các tấm pin mặt trời.

a) Ghi vị trí của Ga, Sc và Ge vào hình (3) và hình (4).

b) Hoá học của gali rất đáng lưu ý. Chẳng hạn gali oxit là một chất lưỡng tính. Viết công thức của galioxit và các phương trình phản ứng minh hoạ tính chất lưỡng tính của gali hiđroxit.

c) Dự đoán xem oxit của bo có tính axit mạnh hơn hay bazơ mạnh hơn oxit gali. Vì sao?

3. Với n = 5, có các obitan 5s 5p 5d 5f 5g.

a) Có bao nhiêu obitan 5g? bao nhiêu electron g?

b) Trên hình (3) và (4), vẽ thêm nhánh bên đối với các kim loại 5g (với số electron phù hợp) ở vị trí thích hợp.

4. Nếu quan hệ giữa tất cả các số lượng tử vẫn giữ nguyên (như trên đầu bài) chỉ trừ trường hợp giá trị có thể có của m_l bây giờ là

$m_l = -l, -l+1, ..., 0$. (nghĩa là không có số dương).

Vẽ 5 chu kì đầu của bảng tuần hoàn phù hợp với quan hệ trên theo kiểu bảng hình (1) và hình (4).

5. Ghi chữ "e" trên hình (3) và (4) đối với nguyên tố có cấu hình electron ở trạng thái kích thích là $1s^2 2s^2 2p^5 3s^1$.

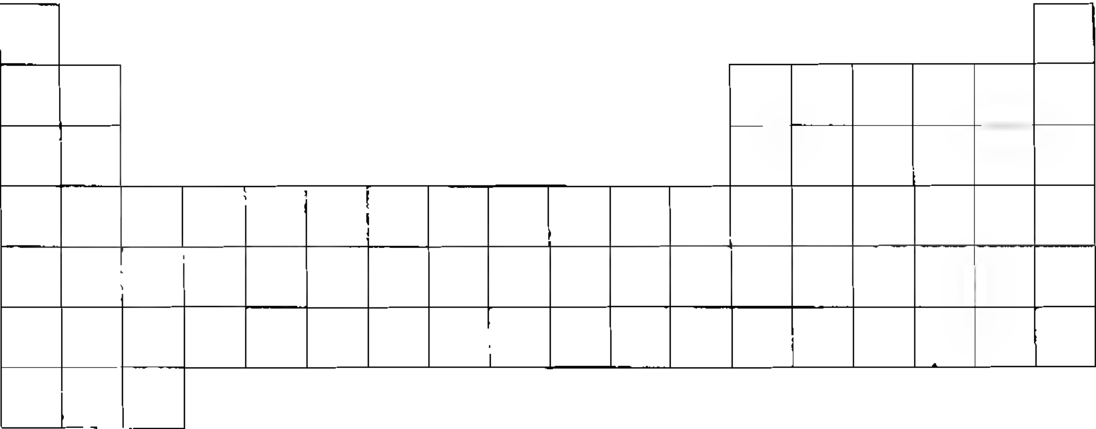
6. Cấu hình electron của một nguyên tử ở trạng thái kích thích là $2s^1 2p^1$. Có bao nhiêu cách sắp xếp có thể có để điền 1 electron vào obitan 2s và 1 electron vào obitan 2p?

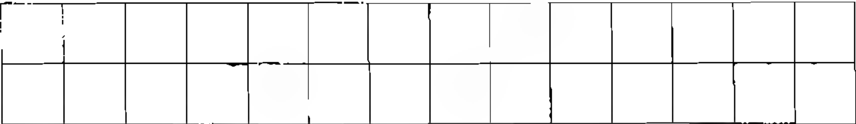
7. Năng lượng ion hoá được định nghĩa là năng lượng cần thiết để tách một electron hoá trị.

Vì sao năng lượng ion hoá các nấc tiếp theo của một nguyên tử bao giờ cũng tăng.

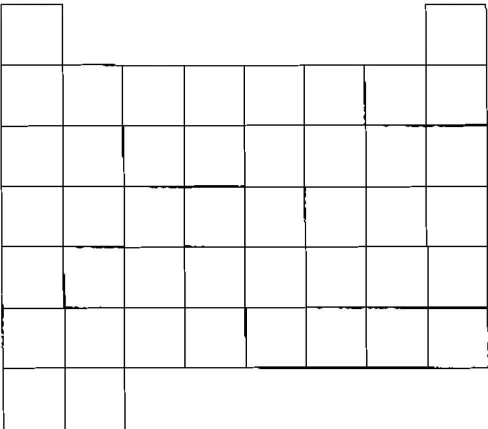
(Theo đề thi Olimpic Hoá học Đài Loan – 1996.)

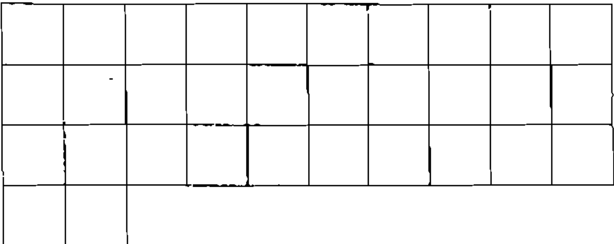
Hình 1

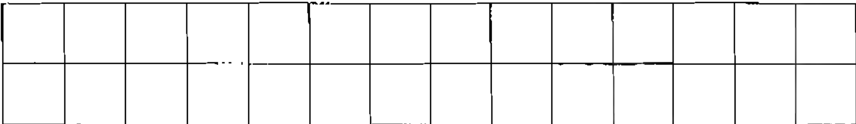




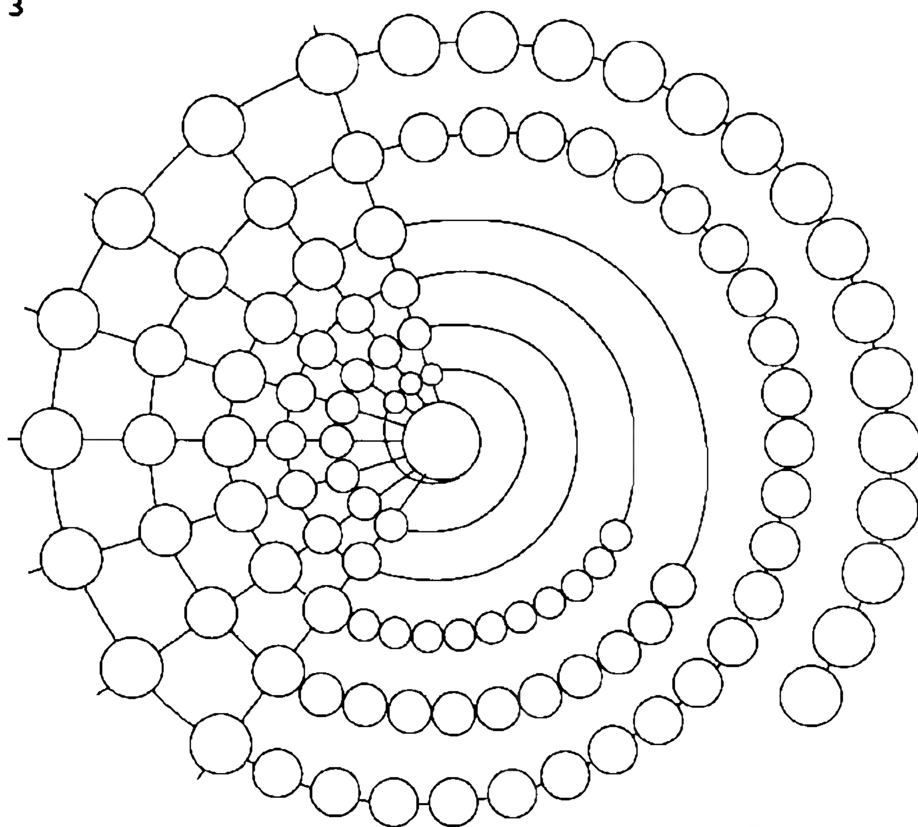
Hình 2







Hình 3



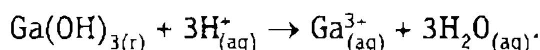
Hình 4

2.2. Bài giải

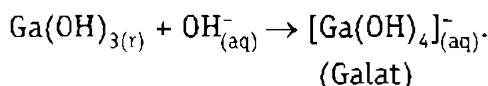
1 ; 2. (a); **3** (b); **5.:** *Xem hình (3) và (4)*

2. b) Công thức của gali oxit Ga_2O_3.

Các phản ứng chứng minh tính lưỡng tính của $Ga(OH)_3$.



$$Ga(OH)_{3(r)} + 3H^+_{(aq)} \rightarrow Ga^{3+}_{(aq)} + 3H_2O_{(aq)}.$$



$$Ga(OH)_{3(r)} + OH^-_{(aq)} \rightarrow [Ga(OH)_4]^-_{(aq)}.$$

(Galat)

c) Oxit boric (B_2O_3) có tính axit mạnh hơn oxit galic Ga_2O_3. Vì nguyên tố bo đứng đầu nhóm IIIA trong bảng tuần hoàn: theo chiều từ trên xuống dưới, tính axit của oxit giảm dần, tính bazơ tăng dần.

3.a) Với n = 5

phân lớp: l = 0, 1, 2, 3, 4,

s, p, d, f, g.

Số obitan trong một phân lớp bằng *(2l + 1) obitan*.

Số electron tối đa trong một phân lớp bằng *2(2l + 1) electron*.

- Như vậy, phân lớp 5g có: (2 × 4 + 1) = 9 obitan.
- Số electron tối đa là: 2(2 × 4 +1) = 18 electron.

4. Bảng tuần hoàn theo quan hệ của bốn số lượng tử như sau:

n = 1, 2, 3, 4, ...

l = 0, 1, 2, 3, ..., (n – 1)

m_l = -l, -l +1, ..., 0. (không có số dương)

$m_s = \pm 1/2$

n = 1 l = 0 ⇒ m_l = 0 (m có 1 trị số, obitan s có tối đa 2 electron s^2)
s

n = 2 l = 0, 1;
s p

l = 1⇒ m_l = –1, 0 (m có 2 trị số, có 2 obitan p, số electron tối đa p^4)

n = 3 l = 0, 1, 2
s p d

⇒ l = 2⇒ m_l = –2, –1, 0 (m có 3 trị số, có 3 obitan d, số electron tối đa d^6)

n = 4 l = 0, 1, 2, 3
s p d f

⇒ l = 3 ⇒ m_l = –3, -2, –1, 0

(m có 4 trị số, có 4 obitan f, số electron tối đa là f^8)

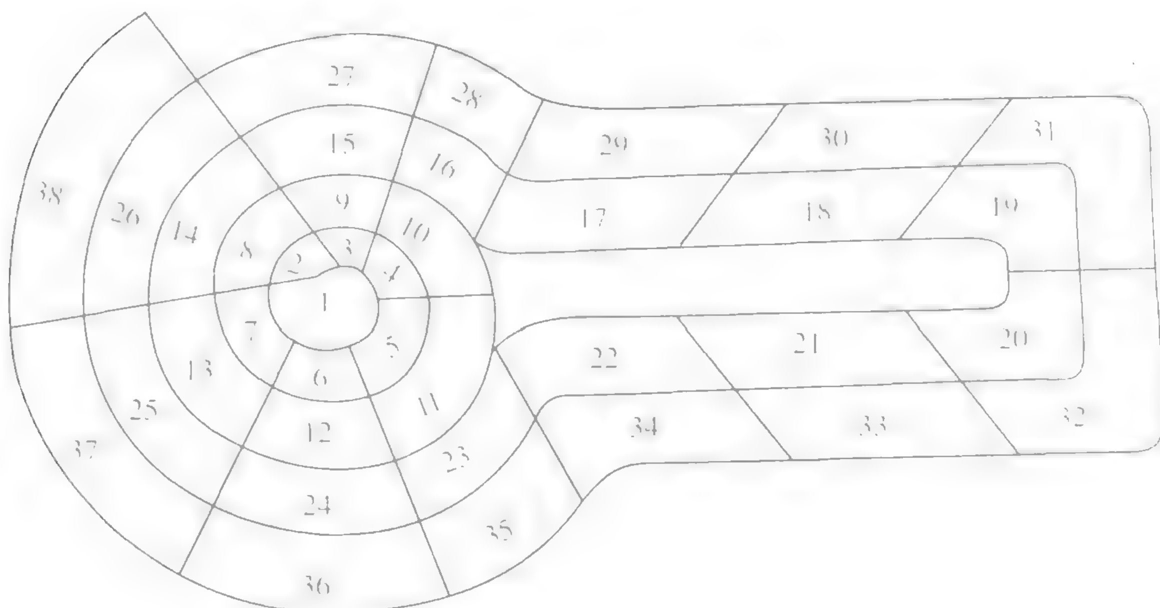
Như vậy, theo quan hệ của 4 số lượng tử như câu 4 thì thứ tự điền electron vào các obitan là :

	$1s^2$	$2s^22p^4$	$3s^23p^4$	$4s^23d^64p^4$	$5s^24d^65p^4$
Chu kì:	1	2	3	4	5

a) Bảng tuần hoàn "mới" theo kiểu hình (1)

Chu kì												
1	1											2
2	3	4							5	6	7	8
3	9	10							11	12	13	14
4	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
5	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38

b) Bảng tuần hoàn trên theo kiểu hình (4).



6. Có 2 × 6 = 12 cách sắp xếp một electron vào obitan 2s và một electron vào các obitan 2p ($2p_x$, $2p_y$, $2p_z$). Nghĩa là ứng với cấu hình electron $2s^12p^1$.

7. Muốn tách electron thứ hai ra khỏi một nguyên tử cần phải thắng lực hút giữa electron (cần tách) và ion tích điện dương. Vì vậy, năng lượng ion hoá thứ hai thường lớn hơn năng lượng ion hoá thứ nhất.

3. HỆ THỐNG TUẦN HOÀN X

3.1. Câu hỏi

Trên tờ "Thông báo về những phát minh kì lạ" số ra gần đây, giáo sư Crute đã công bố kết quả nghiên cứu của ông về dấu vết của một nền văn minh ngoài Trái Đất. Ông tin rằng cư dân ở đó rất gần với loài người chúng ta và có khả năng là họ đã đến thăm Trái Đất cách đây khoảng một triệu năm và để lại những kí tự rất kì lạ.

Một số kí tự đó đã được giải mã và cho thấy nội dung tương tự như những chương đầu của sách hoá đại cương dùng trong các trường đại học của chúng ta. Tuy nhiên, một số quy luật ở thế giới đó có khác với những quy luật chi phối thế giới chúng ta. Chẳng hạn, cấu tạo nguyên tử cũng được mô tả bằng 4 số lượng tử là n, l, m_l và m_s nhưng có điều khác biệt quan trọng về trị số của m_L:

n = 1, 2, 3, ...

l = 0, 1, 2, ..., (n – 1)

m_l = –2l, –2l+1, ..., –1, 0, +1, ..., +2l

$m_s = \pm\frac{1}{2}$

1. Dựa theo những dữ kiện nêu trên, hãy xây dựng 2 chu kì đầu của bảng tuần hoàn trên thế giới X đó (gọi là bảng tuần hoàn X). Để đơn giản hoá, dùng kí hiệu nguyên tử X với cùng số electron như các nguyên tử của chúng ta. Viết cấu hình electron của những nguyên tố đó.

2. Giả định rằng người ngoài Trái Đất dùng nước X để uống và tắm rửa. Dựa vào bảng tuần hoàn mới được xây dựng hãy viết công thức của nước X đó.

3. a) Viết phương trình phản ứng tương ứng với quá trình chủ yếu cung cấp năng lượng và nhiệt cho loài người chúng ta: đốt metan trong oxi.

b) Viết phương trình phản ứng xảy ra khi sản phẩm của sự cháy bị X – liti hiđroxit hấp thụ.

Giải thích tại sao lại chọn các nguyên tố X đó?

(Bài chuẩn bị cho kì thi Olimpic quốc tế về hoá học lần thứ 28 (1995) tại Matxcova.)

3.2. Bài giải

1. Bảng tuần hoàn X (hai chu kì đầu)

n = 1

$\underset{s}{L = 0} \rightarrow m_L = 0 \rightarrow m_s = \pm\frac{1}{2}$ obitan s: $1s^2$ } 2 nguyên tố.

$n = 2$

$L = 0, 1$

Obitan s: $L = 0 \Rightarrow m_L = 0 \Rightarrow m_s = \pm\frac{1}{2}$ obitan 2s: $2s^2$

Obitan p: $L = 1$

$m_L = -2L, ..., 0, ..., +2L$

$-2, -1, 0, +1, +2$

có 5 obitan p ; có 10 electron p $\Rightarrow 2p^{10}$

12 nguyên tố

Khi L = 1, có 5 obitan p (trong thế giới của chúng ta chỉ có 3 obitan p) và số electron p là 10 (chứ không phải là 6).

Như vậy, chu kì trong bảng tuần hoàn X sẽ được mở rộng. Giả sử ở thế giới X đó, quy tắc Hund vẫn đúng thì cấu trúc lớp vỏ của các nguyên tử thuộc hai chu kì đầu sẽ như sau:

H											He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si

H He

Li Be B

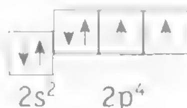
C N O

F Ne Na

Mg Al Si

Cấu hình electron của các nguyên tố thuộc hai chu kì đầu.

2. Công thức của nước trên thế giới chúng ta là H_2O, trong đó có nguyên tố nhẹ nhất là hiđro ($H = 1s^1$) và nguyên tố oxi: $1s^2 2s^2 2p^4$



Ta thấy nguyên tố oxi có 2 electron độc thân, có 1 obitan p đã đầy đủ.

Nước X cũng phải gồm:

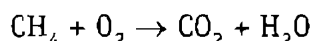
+ Một nguyên tố nhẹ nhất, cũng là H.

+ Một nguyên tố có hai electron độc thân là Mg, hoặc

+ Một nguyên tố chỉ có một obitan p đã đầy đủ là Ne.

Vậy công thức của nước–X là H_2Mg hoặc H_4Ne (với các dữ kiện trên thì chưa biết chính xác hợp chất nào).

3. a) Phản ứng đốt cháy metan trên Trái Đất:



$$CH_4 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$$

– Các nguyên tố trên thế giới X tương ứng với C, H, O trên Quả Đất:

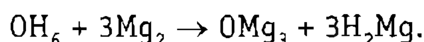
+ Nguyên tố C (trên Trái Đất) dùng tất cả bốn electron ngoài cùng (đều là electron độc thân) để tạo thành liên kết lai hoá sp^3 trong phân tử CH_4.

Trên thế giới X chỉ có nguyên tố O mới có 6 electron ngoài cùng (đều là electron độc thân) để tạo thành liên kết lai hoá sp^5 trong phân tử OH_6.

+ Nguyên tố H (như nhau).

+ Theo câu (2) thì nguyên tố Mg tương ứng với O trên Trái Đất.

Phương trình phản ứng:

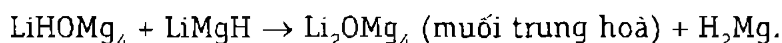


$$OH_6 + 3Mg_2 \rightarrow OMg_3 + 3H_2Mg.$$

b) – Phương trình phản ứng xảy ra khi sản phẩm của sự cháy (tức là OMg_3) bị X liti hấp thụ.



$$OMg_3 + LiMgH \rightarrow LiHOMg_4 \text{ (muối axit)}$$

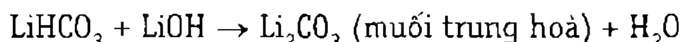


$$LiHOMg_4 + LiMgH \rightarrow Li_2OMg_4 \text{ (muối trung hoà)} + H_2Mg.$$

Các phản ứng trên (ở thế giới X) tương tự các phản ứng CO_2 bị hấp thụ bởi LiOH trên Quả Đất.



$$CO_2 + LiOH \rightarrow LiHCO_3 \text{ (muối axit)}$$



$$LiHCO_3 + LiOH \rightarrow Li_2CO_3 \text{ (muối trung hoà)} + H_2O$$

– Ngoài các nguyên tố tương đương C, O, H đã nêu trong phần (a), còn lại các nguyên tố X – liti cũng là nguyên tố Li trên Trái Đất vì có cùng cấu hình electron $1s^22s^1$.

4. BẢNG TUẦN HOÀN Y

4.1. Câu hỏi

Giả sử có một vũ trụ khác, ở đó những quy luật vật lí không giống những quy luật trên Quả Đất chúng ta.

Trong vũ trụ đó, trạng thái của các electron trong nguyên tử được mô tả bằng 4 số lượng tử là p, q, r, s và ý nghĩa của chúng cũng tương tự như ở ta nhưng liên hệ với nhau theo quy tắc sau:

$$p = 1, \quad 2, \quad 3, \quad 4, \quad 5.$$

q nhận những *số nguyên, lẻ* và $q \le p$.

r nhận tất cả các *số nguyên, chẵn* từ $-q$ đến $+q$, kể cả số không (số 0 được coi là số chẵn)

$$s = -\frac{1}{2} \text{ hoặc } +\frac{1}{2}.$$

1. Phác hoạ ba chu kì đầu của bảng tuần hoàn trong vũ trụ đó (gọi là bảng tuần hoàn Y).

2. Với p = 3, có thể có bao nhiêu electron?

3. Với p = 4, q = 3, r = 2 có thể có bao nhiêu electron?

4. Với p = 4, q = 3, có thể có bao nhiêu electron?

5. Với p = 3, q = 0, r = 0, có thể có bao nhiêu electron?

6. Có thể có bao nhiêu giá trị của q và r đối với p = 5?

7. Với p = 6, có thể có bao nhiêu electron?

(Theo đề thi Olympic hoá học của Mĩ năm 1996.)

4.2. Bài giải

1. Ba chu kì đầu của bảng tuần hoàn Y

• p = 1
q = 0 (loại), 1
r = −1 (loại), 0, +1 (loại)
$s = \pm\frac{1}{2}$.
} p = 1, q = 1, r = 0, $s = \pm\frac{1}{2}$ — *Có 2 e*

• p = 2
q = 0 (loại), 1, 2 (loại)
r = −1(loại), 0, +1 (loại)
$s = \pm\frac{1}{2}$
} p = 2, q = 1, r = 0, $s = \pm\frac{1}{2}$ — *Có 2 e*

• p = 3
q = 0 (loại), 1, 2 (loại), 3

q = 1, r = 0, $s = \pm\frac{1}{2}$ } *Có 2 e*

q = 3
r = −3(loại), −2, −1 (loại), 0, 1(loại), 2, 3 (loại) } q = 3, r = 3 trị số, $s = \pm\frac{1}{2}$ — *có 6 e*

} *Có 8e*

Chu kì 1	1							2
Chu kì 2	3							4
Chi kì 3	5	6	7	8	9	10	11	12

2. Với p = 3 có thể có tối đa 8 electron (Xem trên a).

3. Với p = 4; q = 3; r = 2. } Ở đây chỉ có 1 obitan $\psi_{p,q,r} \equiv \psi_{4,3,2}$ nên chỉ có tối 2 electron.

4. Với p = 4

q = 3

r = −3 (loại), −2, −1(loại), 0, +1(loại), 2, 3 (loại). } Ở đây có 3 obitan $\psi_{4,3,-2}$, $\varphi_{4,3,0}$, $\varphi_{4,3,2}$ nên có 6 *electron*.

5. Với p = 3; q = 0; r = 0 } Vì q chỉ nhận những số lẻ nên không có phân lớp p = 3, q = 0.

6. *Với p = 5*

q = 0 (loại), 1, 2 (loại), 3, 4 (loại), 5 ⇒ *có thể có 3 giá trị của q.*

• q = 1:

r = −1 (loại), 0, + 1 (loại) ⇒ *r có 1 giá trị*

• q = 3:

r = −3 (loại), −2, −1 (loại), 0, 1 (loại), 2, 3 (loại) ⇒ *r có 3 giá trị.*

• q = 5:

r = −5 (loại), −4, −3 (loại), −2, −1 (loại), 0, 1 (loại), 2, 3 (loại), 4, 5 (loại).

⇒ *r có 5 giá trị*

} *r có thể có 9 giá trị*

7. *Với p = 6*

q = 0 (loại), 1, 2 (loại), 3, 4 (loại), 5, 6 (loại).

Với p = 6, q cũng chỉ nhận 3 giá trị như với p = 5, r có thể có 9 giá trị, *như vậy số electron lớp p = 6 có thể có là 18 electron.*

5. SỰ BIẾN ĐỔI TÍNH CHẤT CỦA CÁC NGUYÊN TỐ TRONG HỆ THỐNG TUẦN HOÀN

5.1. Câu hỏi

1. a) Viết cấu hình electron của nguyên tử sắt (Z = 26) ở trạng thái cơ bản. Xác định vị trí trong hệ thống tuần hoàn.

b) Trị số của n và l đối với electron "cuối cùng" khi điền vào các obitan của nguyên tử sắt.

c) Từ tính của nguyên tử sắt ở trạng thái cơ bản.

d) Electron nào bị tách ra khi nguyên tử Fe chuyển thành ion Fe^{2+}?

2. Vẽ hình dạng các obitan d_{xy}; $d_{x^2-y^2}$; d_{z^2}.

3. Đối với nguyên tử hiđro (H) các phân lớp khác nhau trong cùng một lớp có cùng năng lượng trong khi đó thì đối với các nguyên tử khác, các phân lớp khác nhau có năng lượng khác nhau. Vì sao?

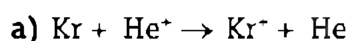
4. Hay giải thích:

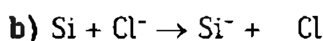
a) Trong một chu kì, năng lượng ion hoá thứ nhất tăng theo chiều tăng số hiệu nguyên tử của các nguyên tố. Vì sao?

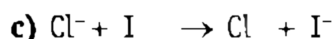
b) Năng lượng ion hoá thứ nhất của bo (Z = 5) lại nhỏ hơn năng lượng ion hoá thứ nhất của beri (Z = 4).

c) Năng lượng ion hoá thứ nhất của oxi (Z = 8) lại nhỏ hơn của nitơ (Z = 7).

5. Dự đoán xem các phản ứng sau đây ở pha khí có khả năng tự diễn biến không? Vì sao?



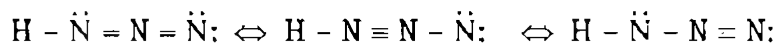




6. Đối với mỗi cặp nguyên tố sau đây, thử xét xem hợp chất nhị tố được tạo thành là hợp chất ion hay cộng hoá trị. Viết công thức của các hợp chất đó:

a) Sr và O　　**c)** Ga và F　　**b)** C và Br　　**d)** N và Br

7. Phân tử HN_3 (axit azohiđric) có thể được mô tả bằng ba cấu trúc cộng hưởng sau:

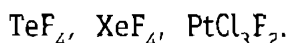


(1)　　　(2)　　　(3)

– Cấu trúc cộng hưởng nào đóng góp ít nhất (kém quan trọng) vào cấu trúc phân tử? Vì sao?

– Hai liên kết N –N trong phân tử có cùng độ dài không? Nếu không thì liên kết nào dài hơn?

8. Viết công thức Lewis và phỏng đoán dạng hình học của các phân tử sau:


TeF_4, XeF_4, $PtCl_3F_2$.

9. Sắp xếp các phân tử sau theo chiều giảm dần góc liên kết $\widehat{HAH}$ trong đó A là nguyên tử trung tâm. Nói rõ lí do sắp xếp.

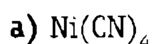
10. a) Vẽ sơ đồ mức năng lượng của các MO đối với phân tử B_2.

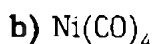
b) Bậc liên kết của B_2.

c) B_2 thuận từ hay nghịch từ.

d) Độ dài liên kết thay đổi như thế nào khi B_2 biến đổi thành B_2^+.

11. Xét các obitan lai hoá của nguyên tử trung tâm trong mỗi chất sau:


a) $Ni(CN)_4$

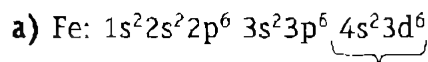

b) $Ni(CO)_4$


c) $[NiCl_4]^{2-}$

(Theo đề thi Olympic hoá học của Đài Loan năm 1997.)

5. 2. Bài giải

1. Cấu hình electron của nguyên tử Fe (Z = 26)


a) Fe: $1s^22s^22p^6\ 3s^23p^6\ \underbrace{4s^23d^6}$

n = 4 ⇒ Chu kì 4

(electron hoá trị = 8) ⇒ nhóm VIII
Electron "cuối cùng" là electron d ⇒ nhóm B } Chu kì 4, nhóm VIIIB

⇒ Fe: chu kì 4, nhóm VIIIB

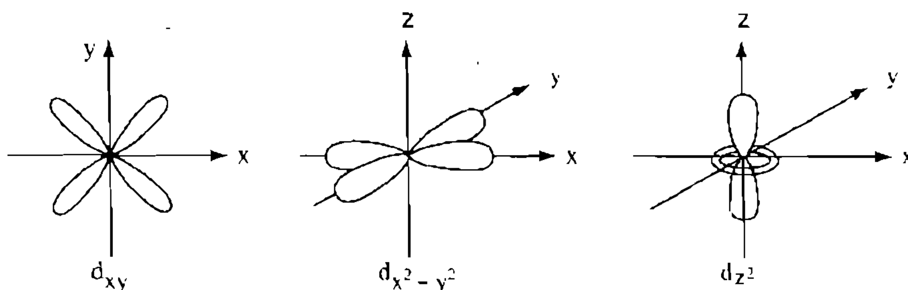
b) Trị số n và l của electron "cuối cùng": n = 3, l = 2 (3d).

c) Ở trạng thái cơ bản nguyên tử Fe thuận từ vì có các electron độc thân.

d) Khi Fe → Fe^{2+} + 2e.

2 electron bị tách ra là 2 electron $4s^2$.

2. Các obitan d

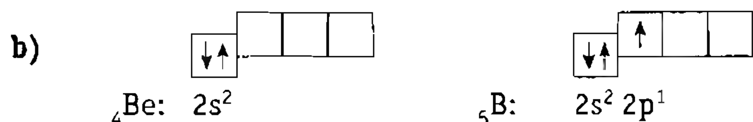


3. Trong nguyên tử H không có lực đẩy electron – electron. Electron trong các phân lớp khác nhau chịu tác động của cùng một điện tích hạt nhân.

Trong các nguyên tử nhiều electron có lực đẩy electron – electron. Electron ở các phân lớp khác nhau có khả năng xâm nhập khác nhau và chịu tác động của điện tích hiệu dụng khác nhau.

4.a) Trong chu kì, nói chung năng lượng ion hoá thứ nhất tăng theo chiều tăng của số hiệu nguyên tử vì khi điện tích hạt nhân tăng thì điện tích hiệu dụng cũng tăng theo.

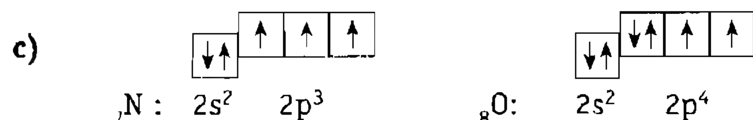
b)



$_4$Be: $2s^2$ $_5$B: $2s^2\ 2p^1$

Phân lớp $2s^2$ đã đầy đủ nên khó tách electron s ra khỏi nguyên tử. Electron $2p^1$ mới điền vào phân lớp 2p, bên ngoài phân lớp $2s^2$ (như một khí "trơ") nên dễ bị tách.

c)

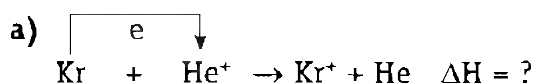


$_7$N : $2s^2$ $2p^3$ $_8$O: $2s^2$ $2p^4$

Electron bị tách ra khỏi O và N đều là electron 2p. Tuy nhiên, ở nguyên tử O, do sự đẩy của 2 electron trong cùng một obitan nên dễ bị tách ra hơn. Hơn nữa cấu hình p^3 ở N là cấu hình electron nửa bão hoà tương đối bền vững nên khó tách electron hơn.

5. Phản ứng nào sau đây có khả năng tự diễn biến:

a)



$Kr + He^+ \rightarrow Kr^+ + He \quad \Delta H = ?$

Năng lượng ion hoá của He $I_{He} = +1351$ kJ/mol

Ái lực với electron của Kr $E_{Kr} = -2371$ kJ/mol

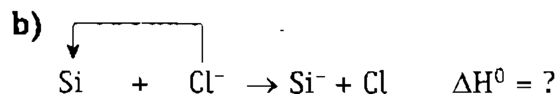
$\Delta H^0 = 1351 - 2371 < 0$

$\Delta S^0 = 0$ (vì chất phản ứng và sản phẩm cùng ở pha khí, không thay đổi số mol)

$\Delta G^0 = \Delta H^0 - \Delta S^0 \approx \Delta H < 0$.

$\Delta G^0 < 0 \Rightarrow$ phản ứng trên có *khả năng tự diễn biến.*

b)



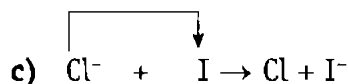
$Si + Cl^- \rightarrow Si^- + Cl \quad \Delta H^0 = ?$

$Cl^- - 1e \rightarrow Cl \quad \Delta H_1 = -E_{Cl} = +349$ kJ/mol

$Si + e \rightarrow Si^- \quad \Delta H_2 = E_{Si} = -134$ kJ/mol

$\Delta H^0 = \Delta H_1 + \Delta H_2 > 0$

$\Delta G^0 \approx \Delta H^0 > 0 \Rightarrow$ Phản ứng *không có khả năng tự diễn biến.*



c) $Cl^- + I \rightarrow Cl + I^-$

Tương tự câu (b) vì Cl có ái lực với electron lớn hơn I. Phản ứng *không có khả năng tự diễn biến.*

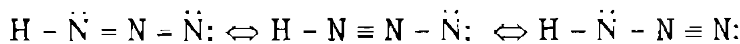
6. a) SrO: hợp chất ion.

b) CBr_4: hợp chất cộng hoá trị.

c) GaF_3: hợp chất ion

d) NBr_3: hợp chất cộng hoá trị.

7. Ba cấu trúc cộng hưởng có thể có của HN_3:



Điện tích hình thức: + 1 0 +1 − 1 +1 +1 +1 −2 +1 − 1 +1 0

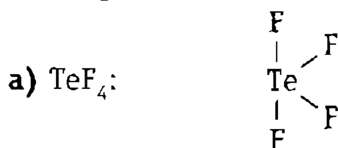
(a) (b) (c)

Thông thường, phân tử càng bền khi điện tích hình thức của mỗi nguyên tử trong phân tử đều bằng không hoặc càng gần số không càng thuận lợi về mặt năng lượng[1].

Theo đó thì cấu trúc cộng hưởng (b) với điện tích hình thức bằng −2 đối với nguyên tử N thứ ba rất không thuận lợi về mặt năng lượng, do đó kém quan trọng, ít đóng góp vào cấu trúc của phân tử nên chỉ kể đến cấu trúc (a) và cấu trúc (c).

Vì vậy, bậc của liên kết N − N ở bên phải được coi là lớn hơn 2, còn bậc liên kết N − N ở bên trái được coi là nhỏ hơn hai, do đó độ dài liên kết N − N bên trái lớn hơn.

8. Công thức Lewis và dạng hình học của các phân tử sau:



- Công thức tổng quát: AB_4U (U 1 cặp electron chưa liên kết).
- Dạng ghế (lưỡng tháp tam giác).

(1) Điện tích hình thức:

Số oxi hoá là "điện tích nguyên tử" trong giới hạn ion.

Điện tích hình thức là "điện tích nguyên tử" trong giới hạn cộng hoá trị. Điện tích hình thức được dùng để viết công thức Lewis và để xét cấu trúc cộng hưởng bền của phân tử.

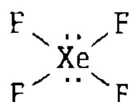
Điện tích hình thức được xác định theo quy tắc sau:

Đ.T.H.T = Số nhóm − (Số electron không liên kết + Số liên kết hoá học).

Ví dụ: Điện tích hình thức của 3 nguyên tử N trong ba cấu trúc cộng hưởng nêu trên của NH_3

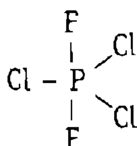
(a) N = 5 − (2 + 3) = 0	(b) N = 5 − 4 = 1	(c) N = 5 − (4 + 2) = −1
N = 5 − 4 = 1	N = 5 − 4 = 1	N = 5 − 4 = 1
N = 5 − (4 + 2) = −1	N = 5 − (6+1) = −2	N = 5 − (2 + 3) = 0

b) XeF_4



- Công thức tổng quát: AB_4U_2.
- Hình vuông.

c) PCl_3F_2



- Công thức tổng quát: AB_3C_2.
- Lưỡng tháp tam giác.

9. a) Sắp xếp các phân tử sau theo chiều giảm dần góc liên kết $\widehat{HAH}$:



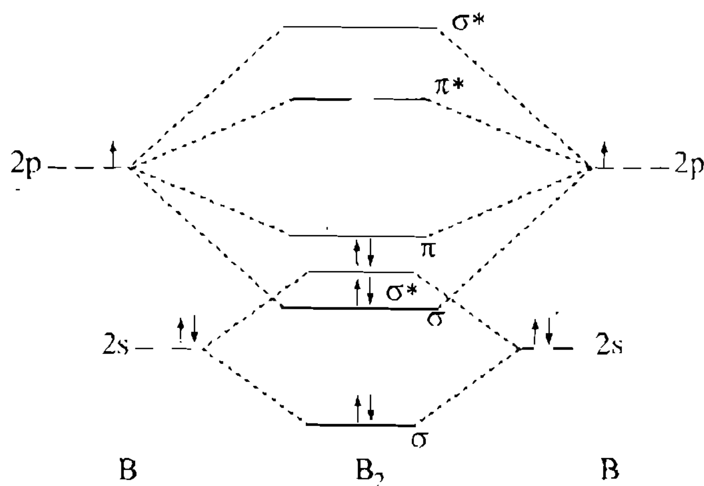
$$:NH_3 > :AsH_3 > :SbH_3$$

Cả 4 phân tử trên đều có cấu trúc tứ diện. Có sự giảm dần góc liên kết $\widehat{HAH}$ là do: trong nhóm VA, theo chiều từ trên xuống dưới, độ âm điện của N, P, As, Sb giảm dần.

Vì vậy, từ $NH_3 \rightarrow SbH_3$ lực hút của hạt nhân với cặp electron liên kết yếu dần. Kết quả là lực đẩy giữa cặp electron chưa liên kết trong nguyên tử trung tâm với các cặp electron liên kết ngày càng mạnh lên, làm góc liên kết giảm đi. Hơn nữa, càng xuống dưới, obitan chưa liên kết chiếm thể tích không gian càng lớn, lực đẩy càng mạnh.

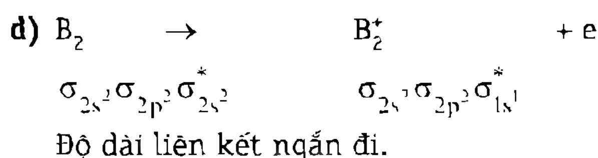
b) CH_4 >	$CH_3-\ddot{C}l$: >	:NH_3 >	$\ddot{O}H_2$.
tứ diện: góc liên kết 109^0	Do các cặp electron chưa liên kết ở clo đẩy các cặp electron liên kết làm góc bị hẹp lại	107^0, do cặp electron chưa liên kết ở nguyên tử trung tâm đẩy mạnh làm hẹp góc liên kết	105^0, do 2 cặp electron chưa liên kết đẩy mạnh 2 cặp electron liên kết ở nguyên tử trung tâm làm hẹp góc liên kết

10. a)



b) Bậc của liên kết B_2 = 1.

c) Chất nghịch từ

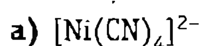
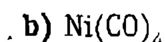


d) $B_2 \rightarrow B_2^+ + e$

$\sigma_{2s^2}\sigma_{2p^2}\sigma^*_{2s^2}$ $\quad\quad$ $\sigma_{2s^2}\sigma_{2p^2}\sigma^*_{1s^1}$

Độ dài liên kết ngắn đi.

11. Obitan lai hoá của các nguyên tử trung tâm trong các chất dưới đây.


a) $[Ni(CN)_4]^{2-}$	**b)** $Ni(CO)_4$	**c)** $[NiCl_4]^{2-}$
vuông, lai hoá dsp^2	tứ diện, lai hoá sp^3	tứ diện, lai hoá sp^3.

6. SỰ BIẾN ĐỔI ĐỘ MẠNH CỦA CÁC HIĐRAXIT

6.1. Câu hỏi

1. Cho biết trong dung dịch nước, pK của các hiđraxit (HX) có các giá trị sau:

	NH_3	H_2O	H_2S	HF	H_2Se	H_2Te
pK:	35	16	7,06	3	3,72	2,64

– Độ âm điện của các nguyên tố X.

	F	O	N	S	Se	Te
χ:	4	3,5	3,0	2,5	2,4	2,1

– Năng lượng liên kết X – H (E_{lk} kJ/mol)

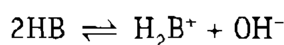
	S – H	Se – H	Te – H	N – H	O – H	F – H
E_{lk}:	339	276	238	389	464	569

Câu hỏi:

Hãy giải thích tại sao sự biến đổi độ mạnh của các hiđraxit nêu trên lại diễn ra theo thứ tự đó?

Vai trò của độ âm điện của nguyên tố X và năng lượng liên kết X – H đối với tính axit của một hiđraxit là gì?

2. Có một số thuyết và định nghĩa khác nhau về axit – bazơ. Một trong các định nghĩa đó có liên quan đến hiện tượng tự phân li của dung môi:



$$2HB \rightleftharpoons H_2B^+ + OH^-$$

Theo thuyết này thì:

– Axit là các chất làm tăng nồng độ cation của dung môi (H_2B^+).

– Bazơ là các chất làm giảm nồng độ cation (hoặc làm tăng phần anion B^-) của dung môi.

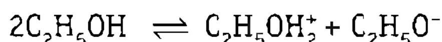
Chẳng hạn nước tự phân li thành:



$$2H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + OH^-$$

Axit là những chất làm tăng nồng độ của H_3O^+; bazơ là những chất làm tăng nồng độ của OH^-.

Trong etanol thì:



$$2C_2H_5OH \rightleftharpoons C_2H_5OH_2^+ + C_2H_5O^-$$

Axit là những chất làm tăng nồng độ của $C_2H_5OH_2^+$ và bazơ là những chất làm tăng nồng độ của $C_2H_5O^-$.

Khi đó, phản ứng trung hoà là phản ứng trong đó một axit tác dụng với một bazơ tạo thành một muối và một dung môi.

Theo lí thuyết này thì $pH = -\log[H_2B^+]$.

(Phần trên là nội dung chủ yếu của lí thuyết về các hệ dung môi)

Câu hỏi:

a) Hãy lấy một ví dụ về một axit và một bazơ trong dung môi amoniac lỏng.

b) Tích số ion của amoniac là $1,0 \times 10^{-29}(mol/L)^2$, độ pH của amoniac lỏng nguyên chất là bao nhiêu?

c) Nước là một axit hay một bazơ trong amoniac lỏng? Nêu lí do.

d) Tại sao CH_3COOH là một axit trong amoniac lỏng? Nó mạnh hơn hay yếu hơn trong dung dịch nước.

e) Một hợp chất là axit mạnh trong nước có thể là một bazơ yếu trong amoniac lỏng hay không? Nếu có, cho một ví dụ. Nếu không thì tại sao?

f) Hãy chỉ ra rằng NaOH là một muối trong amoniac lỏng. Hãy lấy ví dụ về một phản ứng trong đó NaOH được tạo ra trong amoniac lỏng.

g) Có hợp chất nào là một bazơ trong nước mà lại là một axit trong amoniac lỏng không? Nếu có, lấy một ví dụ; nếu không thì tại sao?

h) Liệu có một dung môi nào trong đó nước là một bazơ không? Nếu có, cho một ví dụ; nếu không thì tại sao?

i) Tetraclometan có tính axit hay bazơ không? Nếu có lấy một ví dụ; nếu không thì tại sao?

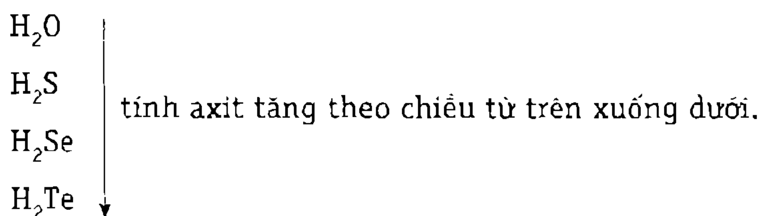
(Câu 2 theo đề thi Olympic Hoá học của Đức năm 1999.)

6.2. Bài giải

1. $_7N$ $_8O$ $_9F$ cùng trong chu kì 2 của hệ thống tuần hoàn.

$\xrightarrow{NH_3 \quad H_2O \quad HF}$ tính axit tăng theo chiều từ trái sang phải.

O, S, Se, Te cùng thuộc nhóm VIA trong hệ thống tuần hoàn.



Sở dĩ như vậy là do:

Trong dung dịch các hiđraxit HX, ion H^+ càng dễ bị tách ra khỏi các phân tử HX, tính axit càng mạnh. Điều đó phụ thuộc vào các yếu tố sau:

– *Độ âm điện (χ) của nguyên tố X càng lớn*, liên kết X – H càng phân cực mạnh, trong dung môi phân cực (cụ thể là nước) càng thuận lợi cho việc tách ion H^+.

– *Liên kết X – H càng kém bền*, ion H^+ càng dễ bị tách ra khỏi phân tử X – H.

• *Trong chu kì*, từ trái qua phải, độ âm điện của các nguyên tố tăng dần (thuận lợi cho sự tách H^+) nhưng năng lượng liên kết cũng tăng (khó khăn cho sự tách H^+).

• *Trong nhóm*, từ trên xuống dưới, độ âm điện của các nguyên tố giảm (kém thuận lợi cho sự tách H^+) nhưng năng lượng liên kết lại giảm (thuận lợi cho sự tách H^+).

Như vậy, sự biến đổi tính chất axit của các hiđraxit phụ thuộc vào *tương quan giữa sự thay đổi χ và E_{lk}* (ngoài ra còn có các yếu tố khác như sự thay đổi entropi của phản ứng, năng lượng hiđrat hoá ion...).

Kết luận:

– Trong chu kì, sự biến đổi độ âm điện quan trọng hơn sự biến đổi năng lượng liên kết nên khi χ tăng, tính axit tăng.

– Trong nhóm, sự biến đổi năng lượng liên kết quan trọng hơn sự biến đổi độ âm điện nên khi E_{lk} giảm, tính axit tăng.

(Điều này được chứng tỏ qua các phép toán cụ thể.)

2. a) Trong amoniac lỏng diễn ra quá trình tự phân li như sau:



$$2NH_3 \rightleftharpoons NH_4^+ + NH_2^-$$

Như vậy thì axit là các chất làm tăng nồng độ NH_4^+, còn bazơ là các chất làm tăng nồng độ NH_2^-.

Ví dụ: NH_4Cl là một axit, KNH_2 là một bazơ.

b) Theo định nghĩa đã cho ở đầu bài thì pH = $-\log[NH_4^+]$.

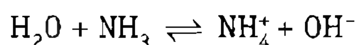
Ta biết $K = [NH_4^+]\,[NH_2^-]$ với $K = 1,0 \times 10^{-29}\ (mol/L)^2$

Vì trong quá trình tự phân li $[NH_4^+] = [NH_2^-]$ nên:

$$[NH_4^+] = 1,0 \times 10^{-14,5}\ mol/L$$

$$pH = 14,5.$$

c) Nước phản ứng như là một axit vì nó làm tăng nồng độ NH_4^+



$$H_2O + NH_3 \rightleftharpoons NH_4^+ + OH^-$$

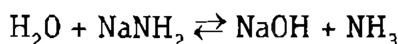
d) $CH_3COOH + NH_3 \rightleftharpoons NH_4^+ + CH_3COO^-$

Axit axetic làm tăng nồng độ NH_4^+, nó là một axit.

Vì NH_3 là chất cho cặp electron chưa liên kết ($:NH_3$) mạnh hơn nước cho nên sự hoà tan axit axetic trong amoniac mạnh hơn trong nước. Vậy nó là axit mạnh hơn trong nước.

e) NH_3 là phân tử cho cặp electron chưa liên kết mạnh hơn H_2O (NH_4^+) hình thành dễ hơn H_3O^+). Như vậy thì sự hoà tan mọi axit trong amoniac đều mạnh hơn trong nước. Vì vậy, một axit trong hệ nước không thể là một bazơ trong hệ amoniac.

f) Phản ứng chứng minh NaOH là một muối được tạo thành trong một phản ứng trung hoà:



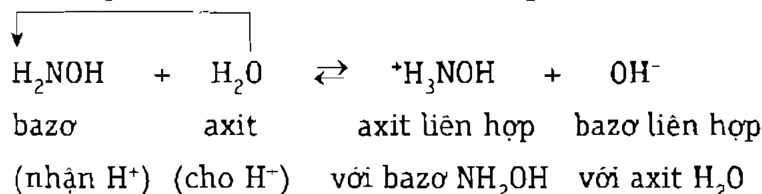
$$H_2O + NaNH_2 \rightleftharpoons NaOH + NH_3$$

(axit + bazơ ⇄ muối + dung môi)

g) Một hợp chất như vậy phải tạo thành OH^- trong nước và NH_4^+ trong amoniac. Đó là một hợp chất có hai chức: nhóm bazơ yếu hơn amoniac ở trong nước và nhóm axit yếu hơn nhóm axit liên hợp với chức bazơ trong dung dịch nước.

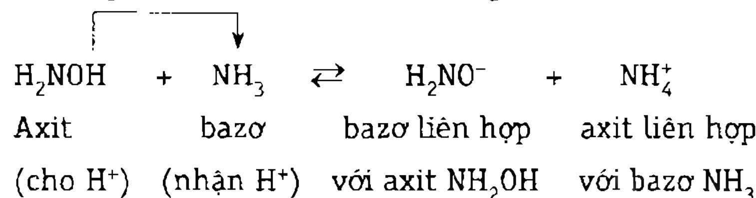
Ví dụ: Hiđroxilamin NH_2OH

– Trong nước se hình thành cân bằng:



H_2NOH	+ H_2O	⇄ ^+H_3NOH	+ OH^-
bazơ	axit	axit liên hợp	bazơ liên hợp
(nhận H^+)	(cho H^-)	với bazơ NH_2OH	với axit H_2O

– Trong amoniac lỏng thì cân bằng chiếm ưu thế là:

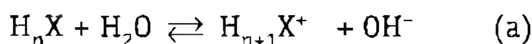


H_2NOH	+ NH_3	⇄ H_2NO^-	+ NH_4^+
Axit	bazơ	bazơ liên hợp	axit liên hợp
(cho H^+)	(nhận H^+)	với axit NH_2OH	với bazơ NH_3

Giải thích bổ sung:

Chất chưa biết cần chứa ít nhất là một H có khả năng tách ra thành H^+ (proton), có thể viết tắt là H_nX.

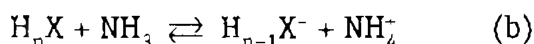
Trong nước, H_nX tác dụng như là một bazơ:



$$H_nX + H_2O \rightleftharpoons H_{n+1}X^+ + OH^- \quad (a)$$

(axit liên hợp của bazơ H_nX)

Trong amoniac, như là một axit:



$$H_nX + NH_3 \rightleftarrows H_{n-1}X^- + NH_4^+ \qquad (b)$$

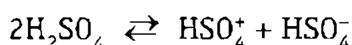
Để cho (b) xảy ra, thì nhóm tác động như là bazơ trong nước phải là tác nhân nhận proton kém hơn NH_3 nghĩa là nhóm đó phải là một bazơ yếu hơn NH_3 (để cho H_nX đóng vai trò là một axit trong phản ứng b).

[Thực tế pK_B (NH_3) = 4,75 và pK_B (NH_2OH) = 8,2.]

Để cho (a) xảy ra, thì nhóm tác động như là axit trong NH_3 phải là tác nhân cho proton yếu hơn axit $H_{n+1}X^+$ (là axit liên hợp của H_nX), nhóm này tác động như là một bazơ.

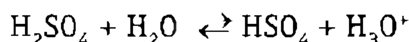
[Thực tế pK(NH_2OH) = 13,2 và pK(NH_3^+OH) = 5,4.]

h) Có. Ví dụ axit sunfuric:



$$2H_2SO_4 \rightleftarrows HSO_4^+ + HSO_4^-$$

phản ứng với nước:



$$H_2SO_4 + H_2O \rightleftarrows HSO_4 + H_3O^+$$

Nước làm tăng nồng độ anion của chính dung môi, nó là một bazơ.

i) Không. Vì CCl_4 không có khả năng tự phân li.

7. SỰ BIẾN ĐỔI ĐỘ MẠNH CỦA OXIAXIT

7.1. Câu hỏi

1. Cho 5 nhóm axit sau: (trong dung dịch nước, cùng nồng độ)

a) H_3PO_4, H_2SiO_4, H_2SO_4, $HClO_4$;

b) H_3AsO_4, HNO_3, H_3PO_4;

c) $HBrO_4$, H_3AsO_4, H_2SeO_4;

d) $HClO_4$, $HClO$, $HClO_3$, $HClO_2$;

e) H_3PO_4, H_3PO_2, H_3PO_3.

Hãy sắp xếp các axit trong mỗi nhóm theo chiều tăng tính axit. Giải thích vì sao?

2. Các dung dịch nào sau đây có tính axit mạnh nhất?

$NaHCO_3$ $K_1 = 10^{-7}$ $K_2 = 10^{-11}$

$NaHSO_3$ $K_1 = 10^{-2}$ $K_2 = 10^{-6}$

$NaHS$ $K = 10^{-7}$ $K_2 = 10^{-13}$

$NaHC_2O_4$ $K_1 = 10^{-2}$ $K_2 = 10^{-5}$

3. Mendeleep đã xếp uran vào nhóm VI của hệ thống tuần hoàn (cùng với crom) dựa vào tính chất kim loại này có hoá trị cao nhất là 6.

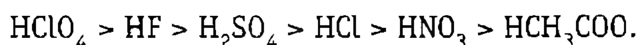
Tuy nhiên, oxit cao nhất của uran "chỉ giống một nửa " với oxit crom tương ứng. Nó tác dụng với kiềm cho hai kiểu muối nhưng còn có thể tác dụng với axit. Những phản ứng này tạo muối là dẫn xuất của hiđroxit hai chức.

a) Tính chất oxit crom (VI) khác oxit uran (VI) ở điểm nào?

b) Viết các phương trình phản ứng của oxit uran (VI) với dung dịch amoniac.

c) Trong các số oxi hoá thấp của uran thì +IV là rất điển hình. Trên cơ sở đó hãy xác định bản chất hoá học của U_3O_8 là thành phần chính của quặng uran.

4. Khi hoà tan các chất sau vào hiđro florua HF lỏng, khan, tính axit của các chất đó được sắp xếp theo thứ tự sau:



$$HClO_4 > HF > H_2SO_4 > HCl > HNO_3 > HCH_3COO.$$

a) Trong dung dịch các chất $HClO_4$, HNO_3, H_2SO_4 (HF là dung môi), tồn tại những phần tử nào?

b) Trong nước thì HCl, H_2SO_4, HNO_3 là những axit mạnh như nhau nhưng trong axit axetic khan (dung môi) thì lại có độ mạnh khác nhau theo trật tự trên. Giải thích tại sao.

(Câu 1 theo đề thi Olympic của Latvia năm 1997, câu 3 của Ukraina năm 1999, câu 2 theo đề thi chọn học sinh giỏi của Italia.)

7.2. Bài giải

1. a) $H_2SiO_3 < H_3PO_4 < H_2SO_4 < HClO_4$;

Vì Si, P, S, Cl cùng thuộc chu kì 4, độ âm điện tăng dần từ trái qua phải.

b) $H_3AsO_4 < H_3PO_4 < HNO_3$;

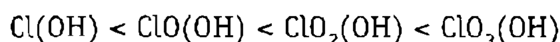
Vì As, P, N cùng thuộc nhóm VA, độ âm điện tăng từ dưới lên trên. Khi độ âm điện của nguyên tử trung tâm tăng, khả năng hút electron từ ← O ← H tăng làm cho H^+ càng dễ bị tách ra, tính axit tăng.

c) $H_3AsO_4 < H_2SeO_4 < HBrO_4$;

Vì As, Se, Br cùng thuộc chu kì 5, độ âm điện tăng dần từ trái qua phải.

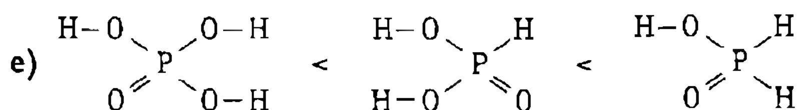
d) $HClO < HClO_2 < HClO_3 < HClO_4$;

Khi số nguyên tử oxi không liên kết với hiđro (để tạo thành nhóm hiđroxyl OH^-) tăng lên thì sức hút của chúng đối với electron từ nguyên tử trung tâm X tăng lên, do đó khả năng hút electron từ ← O ← H tăng lên làm cho H^+ dễ bị tách ra.



$$Cl(OH) < ClO(OH) < ClO_2(OH) < ClO_3(OH)$$

e)



Vì số nguyên tử oxi không liên kết với hiđro trong ba phân tử đều bằng nhau nên pK của ba axit trên không khác nhau nhiều.

2. Các muối axit trên là những chất điện li lưỡng tính:



$MHA \rightarrow M^+ + HA^-$



$HA^- \rightleftarrows H^+ + A^{2-}$ $\qquad K_2 \qquad (2)$

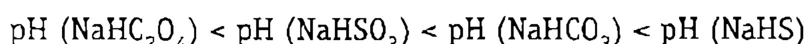


$HA + H^+ \rightleftarrows H_2A$ $\qquad K_1^{-1} \qquad (1)$

pH của dung dịch phụ thuộc vào hai quá trình (1) và (2).

Nếu K_2 càng lớn và K_1 (của phản ứng $H_2A \rightleftarrows H^+ + HA^-$) càng lớn thì dung dịch có pH càng nhỏ (axit càng mạnh) vì quá trình nhường proton (2) xảy ra mạnh, quá trình thu proton (1) xảy ra yếu.

Từ đó suy ra:



$$pH\ (NaHC_2O_4) < pH\ (NaHSO_3) < pH\ (NaHCO_3) < pH\ (NaHS)$$

Áp dụng công thức gần đúng để tính pH của các dung dịch trên

$$pH = \frac{pK_1 + pK_2}{2}$$

$$pH\ (NaHC_2O_4) = \frac{2+5}{2} = 3{,}5$$

$$pH\ (NaHSO_3) = \frac{2+6}{2} = 4{,}0$$

$$pH\ (NaHCO_3) = \frac{7+11}{2} = 9{,}0$$

$$pH\ (NaHS) = \frac{7+13}{2} = 10{,}0$$

Kết quả phù hợp với lí luận ta xét ở trên.

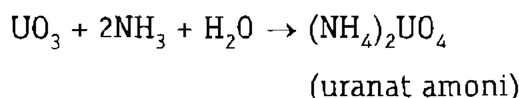
3. a) Oxit crom (VI) CrO_3 có tính chất axit.

Oxit uran (VI) UO_3 có tính lưỡng tính.

b) UO_3 là oxit lưỡng tính:

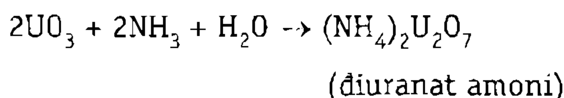
– *Tác dụng với kiềm* tạo thành muối *uranat* có công thức chung là $M_2^I[UO_4]$ (M là kim loại hoá trị 1), tương tự như muối cromat $M_2^I(CrO_4)$.

Thường cũng tạo thành muối *điuranat* có công thức chung là $M_2^I[U_2O_7]$ tương tự đicromat $M_2^I[Cr_2O_7]$.



$$UO_3 + 2NH_3 + H_2O \rightarrow (NH_4)_2UO_4$$

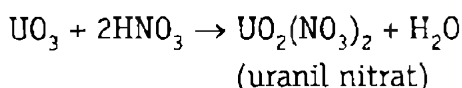
(uranat amoni)



$$2UO_3 + 2NH_3 + H_2O \rightarrow (NH_4)_2U_2O_7$$

(điuranat amoni)

– *Tác dụng với axit* tạo thành muối *uranil* có công thức chung là UO_2X_2 (X là gốc axit hoá trị 1)



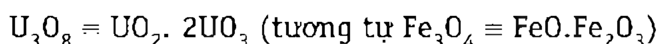
$$UO_3 + 2HNO_3 \rightarrow UO_2(NO_3)_2 + H_2O$$
(uranil nitrat)

c) Bản chất hoá học của U_3O_8

Có thể giải thích theo hai cách:

(1)– Đó là một oxit kép:

Vì số oxi hoá +4 của uran rất điển hình (trong số các số oxi hoá thấp) nên trong oxit kép U_3O_8 phải có một oxit trong đó có U^{IV}. Oxit còn lại là oxit uran VI.



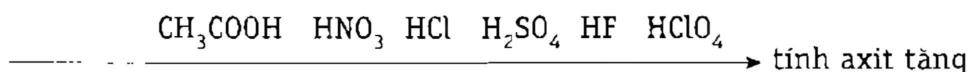
$$U_3O_8 \equiv UO_2.\ 2UO_3 \text{ (tương tự } Fe_3O_4 \equiv FeO.Fe_2O_3)$$

(2)– Đó là một muối:

+ Muối uran uranat $U(UO_4)_2$ (tương tự như $Fe[FeO_2]$ ferat sắt)

+ Hay muối uran oxi điuranat $UO(U_2O_7)$.

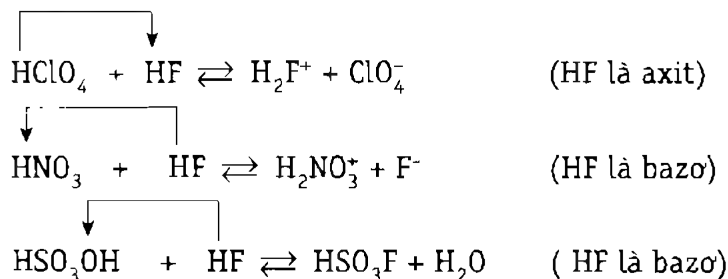
4. a) Cần lưu ý rằng, thứ tự mạnh yếu của các axit trong dung môi HF khan có khác với dung môi nước.



CH_3COOH HNO_3 HCl H_2SO_4 HF $HClO_4$ → tính axit tăng

Chẳng hạn trong nước thì HCl > HF, còn ở đây thì ngược lại.

Trong dung môi HF khan, chỉ có $HClO_4$ xử sự như một axit Bronsted, còn H_2SO_4, HCl, HNO_3 ... xử sự như một bazơ Bronsted. Vì vậy, trong HF khan, tồn tại các chất sau:

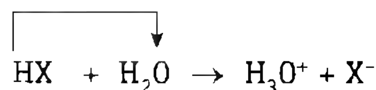


$HClO_4 + HF \rightleftarrows H_2F^+ + ClO_4^-$ (HF là axit)

$HNO_3 + HF \rightleftarrows H_2NO_3^+ + F^-$ (HF là bazơ)

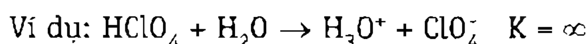
$HSO_3OH + HF \rightleftarrows HSO_3F + H_2O$ (HF là bazơ)

b) Trong nước:



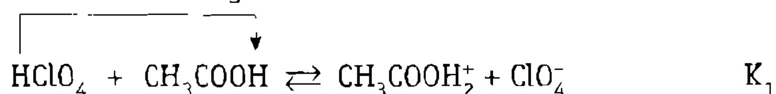
$HX + H_2O \rightarrow H_3O^+ + X^-$

Nước là một dung môi bazơ mạnh, khi hoà tan trong nước, ba axit HCl, H_2SO_4, HNO_3 bị phân li hoàn toàn (phản ứng axit bazơ theo Bronsted diễn ra hoàn toàn) nên coi là mạnh như nhau:

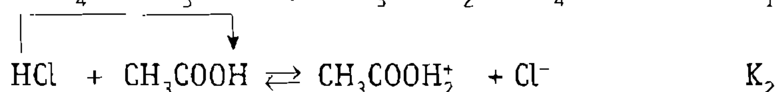


Ví dụ: $HClO_4 + H_2O \rightarrow H_3O^+ + ClO_4^-$ $K = \infty$

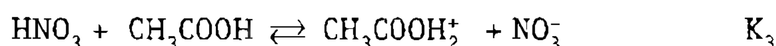
Axit axetic khan có khả năng nhận proton yếu nên chỉ có những axit có độ axit mạnh trong nước mới thể hiện tính axit (nhường proton) trong dung dịch mà axit axetic khan là dung môi:



$HClO_4 + CH_3COOH \rightleftarrows CH_3COOH_2^+ + ClO_4^-$ K_1



$HCl + CH_3COOH \rightleftarrows CH_3COOH_2^+ + Cl^-$ K_2



$HNO_3 + CH_3COOH \rightleftarrows CH_3COOH_2^+ + NO_3^-$ K_3

$K_1 > K_2 > K_3$



$HClO_4 > HCl > HNO_3$

8. SỰ BIẾN ĐỔI TÍNH OXI HOÁ – KHỬ CỦA CÁC NGUYÊN TỐ

8.1. Câu hỏi

1. a) Cho bốn kim loại thuộc chu kì 4 và năng lượng ion hoá thứ nhất (I_1) tương ứng sau:

	$_{26}Fe$	$_{29}Cu$	$_{30}Zn$	$_{31}Ga$
I_1 (kJ/mol)	759	745	906	579

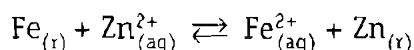
Hãy xếp các kim loại trên theo thứ tự I_1 tăng dần và giải thích tại sao I_1 lại biến đổi như vậy.

b) Cho biết thế khử chuẩn của các kim loại sau trong dung dịch nước là:

	Fe	Cu	Zn
$E^0_{M^{r+}/M}$ (V)	– 0,44	+ 0,34	– 0,76

Hãy sắp xếp các kim loại trên theo thứ tự tính khử tăng dần. Thứ tự này có khác với thứ tự trong câu (a) không? Vì sao?

c) Phản ứng sau đây diễn ra theo chiều nào?



$$Fe_{(r)} + Zn^{2+}_{(aq)} \rightleftarrows Fe^{2+}_{(aq)} + Zn_{(r)}$$

2. Cho biết thế khử chuẩn của một số kim loại trong dung dịch nước như sau:

	Cu	Ni	Co	Cd	Fe	Zn
$E^0_{M^{n+}/M}$ (V)	+0,34	–0,25	–0,27	–0,40	–0,44	–0,76

Hãy chọn cặp kim loại nào để ghép thành một pin, trong đó dòng điện sẽ dễ đổi chiều khi nồng độ của dung dịch thay đổi?

3. Pin Niken – Cadimi (gọi tắt là pin Nicad) là một pin thứ cấp có thể "sạc" lại được.

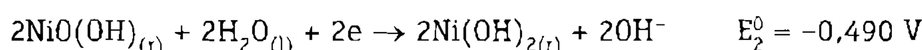
Pin Nicad được sử dụng rộng rãi trong các thiết bị xách tay như thiết bị vô tuyến, máy ghi hình, máy tính...

Pin Nicad có hiệu quả kinh tế lớn, có vòng đời cao và làm việc tốt ở các nhiệt độ thấp hoặc cao. Nó không đòi hỏi phải được bảo quản đặc biệt và có thể "nạp lại" tới 2000 lần!

Sự vận hành của pin Nicad dựa vào hai bán phản ứng sau:



$Cd(OH)_{2(r)} + 2e \rightarrow Cd_{(r)} + 2OH^-$ $\quad E_1^0 = -0,809$ V



$2NiO(OH)_{(r)} + 2H_2O_{(l)} + 2e \rightarrow 2Ni(OH)_{2(r)} + 2OH^-$ $\quad E_2^0 = -0,490$ V

trong đó E_1^0 và E_2^0 là thế khử chuẩn ở 25^0C. Hỏi:

a) Phản ứng nào xảy ra ở catot? Viết phương trình Nernst tương ứng đối với thế.

b) Phản ứng nào xảy ra ở anot? Viết phương trình Nernst tương ứng với thế.

c) Viết phương trình phản ứng (đã cân bằng) chỉ ra rằng phản ứng tự diễn biến khi pin phóng điện.

d) Tính sức điện động của pin ở 25^0C.

e) Khối lượng Cd chứa trong một điện thoại di động với điện dung 700 mAh là bao nhiêu?

(Câu 2 theo đề thi Olympic Hoá học Latvia lần thứ 38, năm 1997; câu 3 theo bài tập chuẩn bị thi Olympic quốc tế tại Hi Lạp, năm 2003.)

8.2. Bài giải

1. a) Trong một chu kì năng lượng ion hoá (I_1) của các nguyên tố tăng theo chiều từ trái sang phải do:

- Khi điện tích hạt nhân (Z) tăng, thường điện tích hiệu dụng (Z_{hd}) cũng tăng theo.
- Bán kính nguyên tử giảm dần.

Tuy nhiên, *I_1 còn phụ thuộc vào cấu hình electron của nguyên tố*, vì vậy sự biến đổi I_1 diễn ra không đều đặn.

Cấu hình electron của các nguyên tố:

$_{26}Fe$	$_{29}Cu$	$_{30}Zn$	$_{31}Ga$
$[Ar]3d^64s^2$	$[[Ar]3d^{10}]4s^1$	$[[Ar]3d^{10}]4s^2$	$[[Ar]3d^{10}4s^2]4p^1$
	Tất cả các phân lớp bên trong đều đầy đủ. Lớp 4s tương tự như một "kim loại kiềm"	Tất cả các phân lớp (kể cả $4s^2$) đều đầy đủ	Tất cả các phân lớp bên trong đều đầy đủ. Hơn nữa, các electron $4s^2$ chắn mạnh nên electron $4p^1$ dễ bị tách ra
$I_1(Fe)$ >	$I_1(Cu)$	$I_1(Zn)$ rất cao >>	$I_1(Ga)$ thấp

Ga < Cu < Fe < Zn

$\longrightarrow$ I_1 tăng

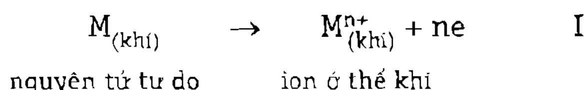
b) Thế khử chuẩn của cặp $\frac{M^{n+}}{M}$ càng âm, tính khử của kim loại M càng mạnh, do đó:



Cu < Fe < Zn

$\longrightarrow$ Tính khử tăng

Thứ tự sắp xếp có khác với câu (a) vì:

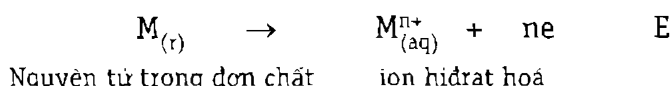


$$M_{(khí)} \rightarrow M^{n+}_{(khí)} + ne \qquad I$$

nguyên tử tự do — ion ở thể khí

I càng lớn, *nguyên tử* kim loại càng khó nhường electron.

Còn thế điện cực E đánh giá khả năng oxi hoá - khử của một *đơn chất* trong dung dịch nước.

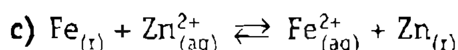


$$M_{(r)} \rightarrow M^{n+}_{(aq)} + ne \qquad E$$

Nguyên tử trong đơn chất — ion hiđrat hoá

(E ứng với quá trình trên là thế oxi hoá, với quá trình ngược lại là thế khử. Dấu của thế khử ngược với dấu của thế oxi hoá).

Trong đại lượng E có bao gồm cả I.



c) $Fe_{(r)} + Zn^{2+}_{(aq)} \rightleftarrows Fe^{2+}_{(aq)} + Zn_{(r)}$

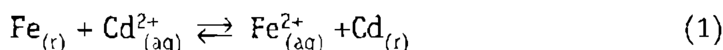
$$\Delta E^o_{pư} = E^o_{ox} - E^0_{kh} = -0,76 - (-0,44) = -0,32 \text{ (V)}$$

$\Delta G^o_{pư} = -nF\Delta E^o_{pư} > 0$, do đó phản ứng sẽ diễn biến theo chiều nghịch.

Điều đó có nghĩa là Zn sẽ đẩy Fe^{2+} ra khỏi dung dịch muối.

2. Chọn các cặp Cd/Fe và Co/Ni, những cặp có thế khử chuẩn gần nhau nhất.

Chẳng hạn, ở điều kiện chuẩn:



$$Fe_{(r)} + Cd^{2+}_{(aq)} \rightleftarrows Fe^{2+}_{(aq)} + Cd_{(r)} \qquad (1)$$

$$\Delta E^0 = E^0_{ox} - E^0_{kh} = -0,40 + 0,44 = +0,04 \text{ (V)}$$

$\Delta G^0 = -nF\Delta E^0 < 0 \Rightarrow$ phản ứng diễn ra theo chiều thuận.

Khi thay đổi nồng độ chẳng hạn:

$$[Cd^{2+}] = 0,01 \text{ mol/l};$$

$$[Fe^{2+}] = 2 \text{ mol/l}$$

Phương trình Nernst: $E = E^0 + \frac{0,06}{n}\lg[M^{n+}]$

$$E_{Cd} = -0,40 + \frac{0,06}{2}\log 0,01 = -0,46 \text{ (V)}$$

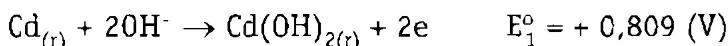
$$E_{Fe} = -0,44 + \frac{0,06}{2}\log 2 = -0,43 \text{ (V)}$$

$$\Delta E = E_{Cd} - E_{Fe} = -0,46 - (-0,43) = -0,03 \text{ (V)}$$

$\Delta G = -nF\Delta E > 0 \rightarrow$ phản ứng ngược chiều với phản ứng (1).

3. Trong pin nicad, anot là Cd, catot là niken oxit, chất điện li là bazơ.

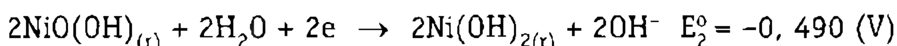
a) Phản ứng ở anot (quá trình oxi hoá)



$$Cd_{(r)} + 2OH^- \rightarrow Cd(OH)_{2(r)} + 2e \qquad E_1^o = +0,809\ (V)$$

Phương trình Nernst: $E_a = E_a^o - \frac{RT}{2F} \ln \frac{1}{[OH^-]^2}$

b) Phản ứng ở catot (quá trình khử)

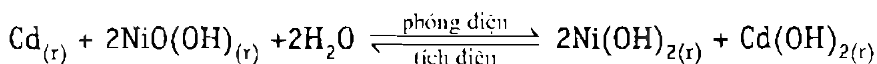


$$2NiO(OH)_{(r)} + 2H_2O + 2e \rightarrow 2Ni(OH)_{2(r)} + 2OH^- \quad E_2^o = -0,490\ (V)$$

Phương trình Nernst:

$$E_c = E_c^o - \frac{RT}{2F} \ln[OH^-]^2$$

c) Phản ứng chung:



$$Cd_{(r)} + 2NiO(OH)_{(r)} + 2H_2O \underset{\text{tích điện}}{\overset{\text{phóng điện}}{\rightleftharpoons}} 2Ni(OH)_{2(r)} + Cd(OH)_{2(r)}$$

$$E^o = E_a^o - E_c^o = 0,809\ V - (-0,490\ V) = 1,299\ (V)$$

$\Delta G^0 = -nFE^0 < 0 \Rightarrow$ phản ứng phóng điện tự diễn biến.

d) Sức điện động của pin là 1,299 V.

e) Khối lượng của Cd trong điện thoại di động có điện dung là 700 mAh

$$700\ mAh = 0,700\ A \times 3600\ s = 2520,0\ C$$

$$2520,0\ C \Rightarrow \frac{2520,0}{2 \times 96485}\ mol\ Cd = 0,013\ mol\ Cd.$$

Khối lượng Cd: 0,013 × 112,4 = 1,47 g Cd.

Hướng dẫn trả lời câu hỏi và bài tập (từ phần 2 đến phần 5)

Phần hai

2.3. Số lượng tử từ spin m_e chỉ liên hệ với electron.

Các số lượng tử chính (n), phụ (hay số lượng tử obitan) l, số lượng tử từ (m_l) đặc trưng cho năng lượng, kích thước, hình dạng và sự định hướng trong không gian của obitan.

2.5. a) n = 2, l không thể bằng 2.

b) c) m_s không thể bằng 0.

d) m_l không thể bằng –3.

2.7. Các tổ hợp có thể có:

	n	l	m_l	m_s		n	l	m_l	m_s
(1)	4	1	+1	$+\frac{1}{2}$	(2)	4	1	0	$+\frac{1}{2}$
(3)	4	1	–1	$+\frac{1}{2}$	(4)	4	1	+1	$-\frac{1}{2}$
(5)	4	1	0	$-\frac{1}{2}$	(6)	4	1	–1	$-\frac{1}{2}$

2.10. Quan hệ giữa các số lượng tử (*trong thế giới khác ta*)

n = 1, 2, 3 ,... (số lớp electron)

l = 0, ... , n (số phân lớp trong 1 lớp)

m_l = (2l + 1) giá trị (số obitan trong 1 phân lớp)

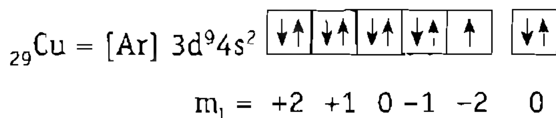
$m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ (chiều quay của electron).

n	l	m_l	m_s	Số electron trong phân lớp	Số electron trong lớp thứ n
1	0 (1s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	8
	1 (1p)	–1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ đối với mỗi giá trị cua m_l	6	
2	0 (2s)	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	18
	1 (2p)	–1, 0, +1	$\pm\frac{1}{2}$ đối với mỗi giá trị cua m_l	6	
	2 (2d)	–2, –1, 0, +1, +2	$\pm\frac{1}{2}$ đối với mỗi giá trị cua m_l	10	

Hai khí hiếm nhẹ nhất nằm ở cuối chu kì 1 (n = 1) và chu kì 2 (n = 2) có số hiệu nguyên tử là 8 và 18.

2.20. Cấu hình electron của nguyên tử Cu (Z = 29).

a) – Nếu viết theo thứ tự điền electron vào các obitan có mức năng lượng tăng dần.



$${}_{29}Cu = [Ar]\ 3d^9 4s^2$$

m_l = +2 +1 0 −1 −2 0

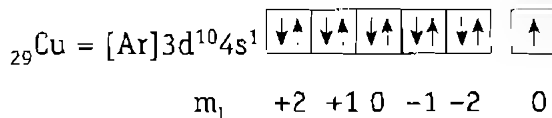
• $M_L = \sum m_l = 2 \Rightarrow L = 2$ trạng thái D

• Độ bội $g = 2S + 1 = 2 \times \frac{1}{2} + 1 = 2$

• $J = L + S = 2 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$

Cấu hình trên ứng với số hạng quang phổ nguyên tử ${}^2D_{3/2}$, không phù hợp với đầu bài.

– Trên thực tế, số hạng quang phổ nguyên tử của đồng là ${}^2S_{1/2}$ ứng với cấu hình electron:



$${}_{29}Cu = [Ar]3d^{10}4s^1$$

m_l +2 +1 0 −1 −2 0

• $M_L = \sum m_l = 0 \Rightarrow L = 0$, trạng thái S

• g = 2

• $J = L + S = \frac{1}{2}$

(SHQPNT)Cu là ${}^2S_{1/2}$

b) Cấu hình electron của nguyên tử Ru (Z = 44)

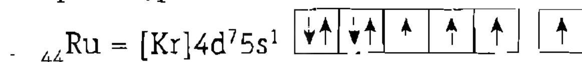
– Viết theo thứ tự mức năng lượng của obitan tăng dần:



$${}_{44}Ru = [Kr]4d^6 5s^2$$

Xét tương tự câu (a), thấy không phù hợp với SHQPNT đã cho là ${}^5F_5$.

– Cấu hình electron phù hợp sẽ là :



$${}_{44}Ru = [Kr]4d^7 5s^1$$

Xét tương tự như trên ta sẽ có:

L = 3 (trạng thái F); có 4 electron độc thân ⇒ độ bội là 5.

$J = L + S = 3 + (4 \times \frac{1}{2}) = 5 \Rightarrow$ (SHQPNT)Ru là ${}^5F_5$.

Nhận xét:

Trường hợp (a) và (b): Vì năng lượng của các phân mức ns ≈ (n − 1)d nên electron ở phân lớp 4s "nhảy" vào phân lớp (n−1)d, tạo thành phân lớp (n − 1)d bão hoà (Cu), nửa bão hoà (Mo) hoặc trên tới bão hoà (Tc, Ru, Rh, Pd).

2.26. b) Khi electron trong nguyên tử vàng chuyển từ phân lớp 5d lên lớp 6s, nó cần hấp thụ một năng lượng là 2,7 eV (1 eV = $1,602 \times 10^{-19}$J)

Ta biết năng lượng đó (E) ứng với sóng ánh sáng có tần số ν

$$E = h\nu$$

h là hằng số Planck, h = $6,626 \times 10^{-34}$J.s

$\nu = \frac{c}{\lambda}$ c là tốc độ ánh sáng = $3,00 \times 10^8$m/s

λ là bước sóng ứng với tần số trên.

$$E = h\frac{c}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{h.c}{E}$$

$$\lambda = \frac{(6,626 \times 10^{-34} J.s)(3,00 \times 10^8 \ m/s)}{2,7 \times (1,602 \times 10^{-19} J)} = 4,18 \times 10^{-7} m \text{ hay } 4180 \ \mathring{A}$$

Như vậy, bước sóng bị hấp thụ là 4180 Å, ứng với màu quang phổ (màu bị hấp thụ) là màu tím và màu ta quan sát được (màu phụ) là màu vàng.

Đây là điều khác biệt giữa vàng và các kim loại khác.

Các kim loại hấp thụ các bước sóng ánh sáng gần như nhau nên đều có "vẻ sáng kim loại" đặc trưng, còn kim loại vàng thì có màu vàng.

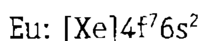
2.27. a) Eu (Z = 63) (SHQPNT) $^8S_{7/2}$

Độ bội g = 8 ⇒ có 7 electron độc thân

S ứng với số lượng tử obitan nguyên tử L = 0 (M_L = 0)

$$J = L + S = \frac{7}{2}$$

Vậy cấu hình electron của nguyên tử Eu là :

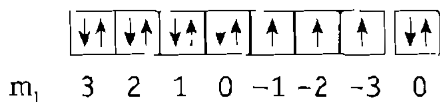


Eu: $[Xe]4f^76s^2$

2.28. c) Es (Z = 99) (SHQPNT) $^4I_{15/2}$

Độ bội g = 4 ⇒ có 3 electron độc thân.

I ứng với L = 6 ⇐ do $M_L = \sum m_l = 6$



m_l 3 2 1 0 −1 −2 −3 0

$$J = L + S = 6 + \frac{3}{2} = \frac{15}{2}$$

Vậy cấu hình electron nguyên tử Es là : *[Rn]5f¹¹7s²*.

Phần ba

3.2. *Ví dụ:*

– Năng lượng ion hoá thứ nhất của sắt là 7,90 eV, của kẽm là 9,39 eV (nguyên tử tự do sắt dễ mất electron hơn kẽm).

– Thế khử chuẩn của sắt (đơn chất) là –0,44 V, của kẽm (đơn chất) là –0,76 V. Vì vậy kẽm (kim loại) đẩy ion $Fe^{2+}_{(aq)}$ ra khỏi dung dịch muối của nó (kẽm nhường electron cho sắt).

3.3. – Đối với các phi kim, bán kính cộng hoá trị được coi là bán kính nguyên tử.

– Đối với các kim loại, bán kính kim loại được coi là bán kính nguyên tử.

– Đối với các khí hiếm, bán kính Van de Van được coi là bán kính nguyên tử.

3.9. a) Xem bảng tuần hoàn dạng dài 18 ô ta thấy:

Từ Mg (nhóm IIA) đến Al (nhóm IIIA) có Z = 12 ⇒ Z = 13.

Từ Ca (nhóm IIA) đến Ga (nhóm IIIA) có Z = 20 ⇒ Z = 31 (cách nhau 10 nguyên tố nhóm B); trong chu kì, r nguyên tử giảm khi Z tăng, do đó $r_{Ga} < r_{Al}$.

b) Hiđroxit của Al và Ga đều lưỡng tính nhưng tính axit của $Ga(OH)_3$ lớn hơn của $Al(OH)_3$. [$K_a(Ga(OH)_3) = 2,5 \times 10^{-3}$; $K_a(Al(OH)_3) = 7,9 \times 10^{-6}$]

3.13. Các quá trình (a), (b), (c), (e), (k), không đúng ý nghĩa của năng lượng ion hoá.

3.14. d) Đối với mỗi nguyên tố hoá học, có bước nhảy vọt về năng lượng ion hoá khi tất cả các electron hoá trị đã bị tách ra và bắt đầu tách electron thứ nhất của lớp bên trong.

Như vậy, nhìn vào một dãy các giá trị năng lượng ion hoá liên tiếp, ta có thể xác định được số electron hoá trị. Ví dụ: Câu (c).

c) Trong câu hỏi c) ta thấy có 6 electron hoá trị vì I_6 = 8495 eV, trong khi đó I_7 = 27106 eV, gấp hơn 3 lần, có bước nhảy vọt.

Như vậy, nguyên tố trên có 6 electron hoá trị, đều ở lớp ngoài cùng, do đó nó thuộc nhóm VIA, lại ở chu kì 3 (theo đầu bài).

Vậy, đó là lưu huỳnh.

3.15. a) Sự chắn xảy ra khi electron ở các lớp bên trong "chắn" (bảo vệ) các electron ở lớp bên ngoài không bị sức hút trọn vẹn của hạt nhân mà làm giảm sức hút đó.

– Điện tích hạt nhân hiệu dụng (Z_{hd}) là điện tích hạt nhân có tác động thực sự tới electron.

– Khi số electron chắn tăng thì điện tích hiệu dụng giảm.

b) Electron xâm nhập càng mạnh, tác dụng chắn electron bên ngoài càng lớn. Vì các electron s xâm nhập mạnh hơn electron p, p hơn d nên năng lượng của phân mức s < p < d < f. (Các electron s chắn mạnh hơn p, p hơn d,...)

3.18. Những yếu tố ảnh hưởng đến năng lượng ion hoá:

– Bán kính nguyên tử.

– Điện tích hạt nhân nguyên tử.

– Sự chắn của các electron bên trong đối với electron bên ngoài.

– Sự xâm nhập của các electron vào các lớp bên trong.

– Điện tích hiệu dụng của hạt nhân ($Z_{hd} = Z - \sigma$)

$$\sigma_s > \sigma_p > \sigma_d > \sigma_f.$$

– Cấu hình electron.

3.21. a) Tần số sóng ánh sáng thấp nhất có thể ion hoá nguyên tử natri



$Na_{(k)} \rightarrow Na^+_{(k)} + 1e + I_1$

$I_1 = 5,138$ eV $\qquad$ $1eV = 1,602 \times 10^{-19}J$

$I_1 = 5,138 \times 1,602 \times 10^{-19}J = 8,231 \times 10^{-19}J$

$I_1 = E = h\nu$, h là hằng số Planck = $6,626 \times 10^{-34}J.s$

ν là tần số sóng ánh sáng.

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{8,231 \times 10^{-19}J}{6,626 \times 10^{-34}Js} = 1,24 \times 10^{15} \text{ hertz}$$

Độ dài sóng tương ứng là:

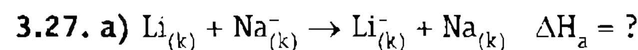
$\nu.\lambda = c$ $\qquad$ c là tốc độ ánh sáng = $3,00 \times 10^8$ m/s

$$\Rightarrow \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3,00 \times 10^8 m/s}{1,24 \times 10^{15} m/s} = 2,420 \times 10^{-7} \text{ m}$$

hay $\lambda = 2420$ Å

3.22. – Dựa vào việc tính năng lượng ion hoá (I tỉ lệ thuận với $(Z - \sigma)$), nếu tách electron ns thì $\sigma_s = \sum\sigma_i$ sẽ lớn hơn $\sigma_d = \sum\sigma_i$ (σ_i là hằng số chắn của mỗi electron), do đó năng lượng ion hoá sẽ nhỏ hơn nếu tách electron (n – 1)d.

– Dựa vào số hạng quang phổ nguyên tử được xác định bằng thực nghiệm.



3.27. a) $Li_{(k)} + Na^-_{(k)} \rightarrow Li^-_{(k)} + Na_{(k)} \quad \Delta H_a = ?$



$Li_{(k)} + e \rightarrow Li^-_{(k)}$ $\qquad$ ái lực với electron $\quad E_{Li} = -0,58$ eV $\qquad$ (1)



$Na_{(k)} + e \rightarrow Na^-_{(k)}$ $\qquad E_{Na} = -0,78$ eV $\qquad$ (2)

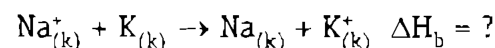


Hay $Na^-_{(k)} \rightarrow Na_{(k)} + e$ $\qquad -E_{Na} = +0,78$ eV $\qquad$ (3)

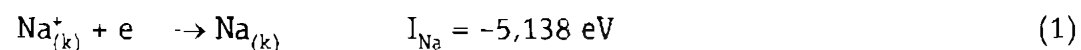
Cộng (1) và (3) ta có: $\Delta H = E_{Li} - E_{Na} = -0,58 + 0,78 > 0$

$\Delta H_a > 0$ vì ái lực với electron của natri có giá trị âm hơn của liti.

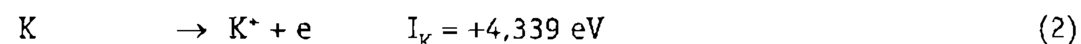
b)



$Na^+_{(k)} + K_{(k)} \rightarrow Na_{(k)} + K^+_{(k)} \quad \Delta H_b = ?$



$Na^+_{(k)} + e \rightarrow Na_{(k)}$ $\qquad I_{Na} = -5,138$ eV $\qquad$ (1)

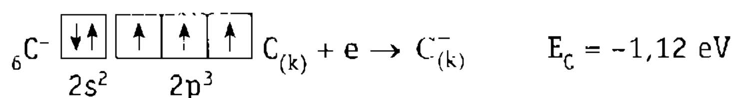


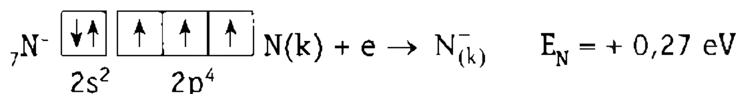
$K \rightarrow K^+ + e$ $\qquad I_K = +4,339$ eV $\qquad$ (2)

Cộng (1) và (2) ta có $\Delta H_b = -5,138 + 4,339 < 0$

$\Delta H_b < 0$ vì năng lượng ion hoá của kali nhỏ hơn của natri.

3.29. b) Đó là do cấu hình electron. Chẳng hạn C (IVA) và N (VA)





– Khi nguyên tử C nhận thêm 1e, ion C^- có cấu hình electron: $2p^3$, nửa bão hoà tương đối bền, vì vậy quá trình nhận electron thuận lợi $E_C < 0$.

– Ngược lại, khi nguyên tử N nhận thêm 1e, ion N^- có cấu hình $2p^4$ trong đó có 2e cùng trong 1obitan (chẳng hạn $2p_x$), không thuận lợi về mặt năng lượng vì vậy $E_N > 0$.

3.30. Dựa vào đại lượng ái lực với electron có thể biết được một số tính chất sau:

+ Nói chung, với các phi kim, ái lực với electron có giá trị âm, các phi kim mạnh có giá trị âm lớn (như các halogen, oxi,...).

+ Dùng đại lượng ái lực với electron để tính năng lượng mạng lưới tinh thể ion.

+ Để tính độ mạnh của các hiđraxit.

+ Để tính độ âm điện của một nguyên tố v.v...

3.31. b) Độ âm điện không phải là tính chất của các nguyên tử tự do mà đặc trưng định lượng cho khả năng của *nguyên tử trong phân tử* hút eletron về phía mình.

c) Nó không phải là hằng số với một nguyên tố mà thay đổi theo một số điều kiện, chẳng hạn thay đổi theo trạng thái oxi hoá, theo kiểu liên kết v.v...

3.34. Điện cực là một thiết bị, chẳng hạn một thanh kim loại hay một sợi dây điện để dẫn electron vào trong dung dịch hay ra khỏi dung dịch.

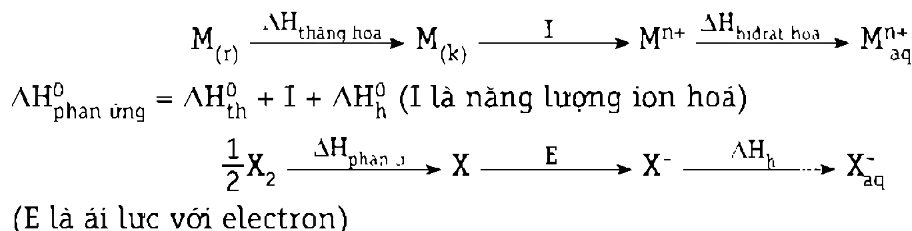
3.36. Thế điện cực (E^0) là thước đo độ mạnh của các chất oxi hoá và chất khử.

3.39. E^0 có liên quan trực tiếp với I (năng lượng ion hoá), E (ái lực với electron) và X (độ âm điện).

M: kim loại ; X: phi kim.

Các quá trình sau đây cho thấy sự liên quan giữa I, E và E^0.

Các phản ứng oxi hoá khử xảy ra trong dung dịch:



$$M_{(r)} \xrightarrow{\Delta H_{\text{thăng hoa}}} M_{(k)} \xrightarrow{I} M^{n+} \xrightarrow{\Delta H_{\text{hiđrat hoá}}} M^{n+}_{aq}$$

$\Delta H^0_{\text{phản ứng}} = \Delta H^0_{th} + I + \Delta H^0_h$ (I là năng lượng ion hoá)

$$\frac{1}{2}X_2 \xrightarrow{\Delta H_{\text{phân li}}} X \xrightarrow{E} X^- \xrightarrow{\Delta H_h} X^-_{aq}$$

(E là ái lực với electron)

$$\Delta H^0_{pư} = \Delta H^0_{pl} + E + \Delta H^0_h$$

Ta biết rằng $\Delta H^0 \approx \Delta G^0 = -nFE^0$ (E^0 là thế điện cực)

$E^0 \approx -\frac{\Delta H^0_{pư}}{nF}$ n là số electron trao đổi; F là số Faraday.

– Như vậy, I và E là những yếu tố quan trọng quy định giá trị của thế điện cực. Quá trình tính toán cụ thể sẽ thấy: I càng nhỏ (kim loại càng mạnh) thì thế khử chuẩn càng âm.

E càng âm (phi kim càng mạnh) thì thế khử chuẩn càng dương.

– Độ âm điện của một nguyên tố càng lớn (tính phi kim mạnh) thì thế khử chuẩn càng dương và ngược lại.

Phần bốn

4.2. Vì tất cả các tính chất sau của các hợp chất của các nguyên tố với hiđro (các hiđrua) đều biến đổi tuần hoàn:

– Tính axit – bazơ của dung dịch các hiđrua.

– ΔH tạo thành các hiđrua (quy định độ bền của các hiđua).

– Tính chất của liên kết của các hiđrua (ion, cộng hoá trị) quy định trạng thái vật lí: rắn, lỏng, khí.

+ Liên kết hiđro: ảnh hưởng đến nhiệt độ sôi, nhiệt bay hơi của các chất...

4.10. b) Do sự nén lantanit nên sau lantan (số 57) bán kính nguyên tử của các nguyên tố chu kì 6 gần như bán kính nguyên tử của các nguyên tố cùng nhóm thuộc chu kì 5 (thậm chí có khi còn giảm đi). Ví dụ:

Chu kì 4	Se	Ti	V	Cr
(3d)	1,62	1,47	1,34	1,25
Chu kì 5	Y	Zr	Nb	Mo
(4d)	1,80	1,60	1,46	1,39
Chu kì 6	La	Hf	Ta	W
(5d)	1,87	1,58	1,46	1,39 v.v...

Do đó, tính axit – bazơ của các oxit và hiđroxit của các nguyên tố nhóm B biến đổi không đều đặn như các nguyên tố nhóm A.

4.13. a) O **b)** Cs **c)** Ar **d)** C **e)** Rb **g)** Bi
h) Tl **i)** Kr **k)** Si **l)** Rn **m)** V **n)** Y
o) Sc **p)** Mn

4.17. a) Na (B) **b)** Ni (H) **c)** Al, Bi, Cl, Kr (F, C, I, G)

d) Pr (A) **e)** Pr, No (A, D) **g)** Cl (I)

h) Na, Be (B,J) **i)** No (D) **k)** Sc, Ni, Ag (K, H, E)

l) Kr (G)

4.19. Theo quy luật biến đổi tính kim loại, phi kim trong hệ thống tuần hoàn,

– Từ trái sang phải, tính kim loại giảm.

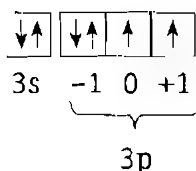
– Từ trên xuống dưới tính kim loại tăng dần. → (Li ≈ Mg).

Ta lại biết $r_{Li^+} = 0,68$ Å $r_{Be^{2+}} = 0,59$Å

$r_{Mg^{2+}} = 0,67$ Å $r_{Al^{3+}} = 0,68$ Å

do đó tính chất axit – bazơ của các hiđroxit gần nhau.

4.20. a) $_{16}S$: $1s^22s^22p^63s^23p^4$



$n_{max} = 3 \Rightarrow$ Chu kì 3.

Số electron hoá trị ($3s^23p^4$) = 6 lại đều ở lớp ngoài cùng ⇒ nhóm VIA.

b) n = 3; l = 1; m_l = 1 (hoặc 0, hoặc –1); $m_s = +\frac{1}{2}$ (hoặc $-\frac{1}{2}$)

c) I thấp nhất: S; bán kính nhỏ nhất: O.

d) $r_S < r_{S^{2-}}$

e) $SO_{2(k)} + 2Cl_{2(k)} \rightarrow OSCl_{2(k)} + Cl_2O_{(k)}$ $\Delta H^0_{pư} = 164,6$ kJ.

Để tạo ra 1 mol $OSCl_2$ cần164,6 kJ, vậy đó chính là ΔH^0 của phản ứng ($\Delta H^0_{pư}$)

$\Delta H^0_{pư} = \Delta H^0_{tạo\ thành}(OSCl_2) + \Delta H^0_{tt}(Cl_2O) - \Delta H^0_{tt}(SO_2)$

$\Delta H^0_{tt}(OSCl_2) = \Delta H^0_{pư} - \Delta H_{tt}(Cl_2O) + \Delta H^0_{tt}(SO_2)$

$= 164,6 - 80,3 - 296,8$

$\Delta H^0_{tt}(OSCl_2) = -212,5$ kJ/mol.

Phần năm

5.1. Mỗi kiểu bảng tuần hoàn đều có ý nghĩa nhấn mạnh một số mặt nào đó về quan hệ giữa các nguyên tố hoá học. Ví dụ:

a) Về mối quan hệ giữa các nguyên tố phân nhóm chính và phân nhóm phụ trong cùng một nhóm; thể hiện sự biến đổi tuần hoàn một số tính chất (chẳng hạn số oxi hoá) của các nguyên tố trong cùng một chu kì (dạng ngắn).

b) Sự phát triển liên tục cấu trúc electron của các nguyên tử (do đó sự biến đổi liên tục tính chất của các nguyên tố) trong cùng một chu kì (dạng dài).

c) Sắp xếp các nguyên tố theo mức năng lượng của các electron lớp ngoài cùng tăng dần.

d) Sắp xếp theo khía cạnh địa hoá học, tinh thể học, tạo phức v.v...

Vì vậy, việc nghiên cứu nhiều kiểu bảng giúp ta nhận biết được nhiều mặt biểu hiện của sự biến đổi tuần hoàn tính chất các nguyên tố hoá học.

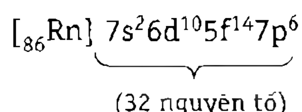
5.4. a) Việc xác định số nguyên tố trong chu kì dựa vào các căn cứ sau:

– Số lượng tử chính n ứng với số chu kì.

Trong dãy thứ tự mức năng lượng của các phân lớp electron trong nguyên tử, mỗi khi n có giá trị mới lại xuất hiện một chu kì mới.

+ Chu kì nào cũng bắt đầu bằng nguyên tố có cấu hình electron ns^1 và kết thúc bằng nguyên tố có cấu hình np^6. Số electron điền vào các obitan từ ns^1 đến np^6 ứng với số nguyên tố trong chu kì.

Theo thứ tự mức năng lượng của các obitan trong nguyên tử, ta có:



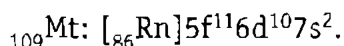
$$[_{86}Rn]\ \underbrace{7s^2 6d^{10} 5f^{14} 7p^6}_{\text{(32 nguyên tố)}}$$

Như vậy, chu kì 7 bắt đầu từ nguyên tố có cấu hình electron $[_{86}Rn]\ 7s^1$ (tức là nguyên tố có Z = 87 mang tên franxi) và kết thúc là nguyên tố khí hiếm $[_{86}Rn]\ 7s^2 6d^{10} 5f^{14} 7p^6$, tức là nguyên tố có Z = 118.

b) Nguyên tố kim loại kiềm thổ của chu kì 8 (chưa tìm ra) sẽ là nguyên tố có cấu hình electron $[118]8s^2$ tức là nguyên tố có số hiệu nguyên tử Z = 120.

5.5. a) Cấu hình electron của nguyên tố 109 (Mt: Meitnerium)

Dựa vào thứ tự mức năng lượng của các obitan trong nguyên tử dự đoán cấu hình electron của Mt là :



$$_{109}Mt:\ [_{86}Rn]5f^{11}6d^{10}7s^2.$$

(Trên thực tế, vì năng lượng các phân lớp ns ≈ (n – 1)d ≈ (n–2)f rất gần nhau, các electron có thể di chuyển từ phân lớp nọ đến phân lớp kia nên cấu hình electron thực tế sẽ phức tạp hơn).

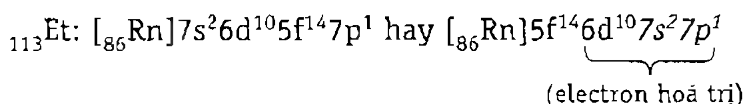
b) Vì các nguyên tố ở chu kì 7 có số thứ tự lớn hơn số thứ tự các nguyên tố đồng đẳng ở chu kì 6 là 32 đơn vị nên đồng đẳng của nguyên tố 109 là 109 – 32 = 77. Đó là số thứ tự của Iriđi.

Vậy nguyên tố Meitnerium (109) thuộc nhóm VIIIB, chu kì 7.

c) Các nguyên tố cùng nhóm là coban (Co), rhođi (Rh), Iriđi (Ir). Tính chất của nó giống Ir nhất.

5.6. a) Cấu hình electron của nguyên tố Et (113)

$_{113}Et$: $[_{86}Rn]7s^2 6d^{10} 5f^{14} 7p^1$ hay $[_{86}Rn]5f^{14}\underbrace{6d^{10}7s^27p^1}$



b) Nguyên tố Et:

+ Có $n_{max} = 7 \Rightarrow$ thuộc chu kì 7.

+ Có 3 electron hoá trị đều ở lớp ngoài cùng $\Rightarrow$ thuộc nhóm IIIA.

Vậy các nguyên tố cùng nhóm là B, Al, Ga, In, Tl.

c) Et_2O_3; $EtCl_3$.

5.7. Các nguyên tố nhóm IVA gồm:

Chu kì	Nhóm IVA	ΔZ
2	$_6C$	
		$\Delta Z = 8$
3	$_{14}Si$	
		$\Delta Z = 18$
4	$_{32}Ge$	
		$\Delta Z = 18$
5	$_{50}Sn$	
		$\Delta Z = 32$
6	$_{82}Pb$	
		$\Delta Z = 32$
7	?	

Nguyên tố nhóm IVA, chu kì 7 phải là nguyên tố có số hiệu nguyên tử

$Z = 82 + 32 = 114$

Cấu hình electron của nguyên tố 114 tương tự nguyên tố 113 (Et) thêm 1 electron vào obitan 7p tức là: $[_{86}Rn]5f^{14}6d^{10}7s^27p^2$.

b) Tính chất vật lí và hoá học:

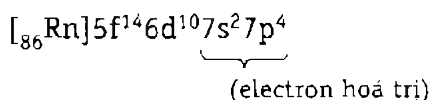
– Theo chiều biến đổi từ trên xuống dưới tính chất của các nguyên tố nhóm IVA thì nguyên tố 114 là một kim loại có nhiệt độ nóng chảy tương đối thấp (trên dưới 300^0C).

– Có số oxi hoá cao nhất là +4, (chẳng hạn $(114)O_2$) và số oxi hoá thấp là +2 (chẳng hạn (114)O). Trạng thái oxi hoá +2 không bền, dễ bị khử thành trạng thái +4.

– Hiđroxit $(114)(OH)_2$ có tính lưỡng tính nhưng tính bazơ trội hơn tính axit.

5.8. Cấu hình electron của nguyên tố 116 (dự đoán)

$$[_{86}Rn]5f^{14}6d^{10}\underbrace{7s^27p^4}$$



- $n_{max} = 7 \Rightarrow$ (116) thuộc chu kì 7.
- Có 6 electron hoá trị, đều ở lớp ngoài cùng $\rightarrow$ thuộc nhóm VIA.

Nó là một kim loại.

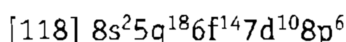
5.9. – Cấu hình elec trron của các nguyên tố thuộc chu kì 8 (theo thứ tự mức năng lượng của các obitan tăng dần).

[118]	8s	5g	6f	7d	8p	
l =	0,	1,	2,	3,	4,	5
kí hiệu:	s	p	d	f	g	h

$l = 4 \Rightarrow m_l = (2l + 1) = 9$ obitan

Số electron tối đa: $2(2l + 1) = 9 \times 2 = 18$ e.

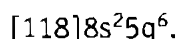
– Số nguyên tố trong chu kì 8:



$[118]\ 8s^2 5g^{18} 6f^{14} 7d^{10} 8p^6$

(50 nguyên tố)

– Cấu hình electron của nguyên tố 126:



$[118] 8s^2 5g^6$.

– Electron thuộc phân lớp có năng lượng cao nhất là electron ở phân lớp có kí hiệu là 5g ứng với các số lượng tử: $n = 5$; $l = 4$.

– Phân lớp này có 9 obitan.

Cước chú:

Cấu hình electron của các nguyên tố trong phần này đều dựa vào thứ tự mức năng lượng của các obitan trong nguyên tử, thực tế phức tạp hơn nhiều.

Phụ lục

NHỮNG NGƯỜI ĐOẠT GIẢI NOBEL HOÁ HỌC

Tổ chức trao giải : Viện Hàn Lâm Khoa học Hoàng gia Thuỵ Điển.

Nhận giải lần đầu : Năm 1901

Jacobus Hericus van't Hoff (Hà Lan)

Giải thưởng năm 2010 – Richard Heck (Mỹ)
– Ei-ichi Negishi (Nhật)
– Akira Suzuki (Nhật)

Thập niên 2000

Năm	Tên	Đóng góp về
2010	– Richard Heck (Mỹ) – Ei-ichi Negishi (Nhật) – Akira Suzuki (Nhật)	Đã có công phát triển một loạt các phản ứng hoá học (ghép nối các nguyên tử cacbon trong các phân tử hữu cơ phức tạp qua xúc tác Palladium) giúp các nhà khoa học điều chế ra nhiều loại dược phẩm mới (chống ung thư, phát hiện ma tuý v.v..) và các chất bán dẫn tốt hơn.
2009	- Ada yonath (Israel) – Thomas Steitz (Mĩ) – Ramakrishnan (gốc Ấn Độ, quốc tịch Mĩ)	Được trao giải cho phát hiện về ribosome, giúp giới khoa học hiểu rõ hơn về sự sống và phát triển thành công nhiều loại thuốc kháng sinh mới
2008	– Roger Y.Tsien (Mĩ) – Martin. Chalfie (Mĩ) – Shimomuira Osamu (Nhật)	Được trao giải cho khám phá đầu tiên về *GFP* và một loạt các phát triển quan trọng dẫn tới việc sử dụng nó như một công cụ quan trọng trong sinh học

Năm	Tên	Đóng góp về
2007	Gerhard Ertl (Đức)	Được trao giải cho nghiên cứu về các phản ứng hoá học trên bề mặt chất rắn. Công trình này tăng cường sự hiểu biết tại sao tầng ozon đang mỏng đi, cách thức các pin nhiên liệu hoạt động và thậm chí tại sao sắt gỉ ?
2006	Roger D.Konberg (Mĩ)	Sáng tỏ cơ chế phân tử của quá trình *phiên mã ở tế bào eukaryvote*
2005	– Yves Chauvin (Pháp) - Robert H. Grubbs (Mĩ) – Richard R. Sch.rock (Israel)	Được trao giải cho nghiên cứu tìm ra cách làm giảm chất thải độc hại khi tạo ra các hoá chất mới
2004	– Aaron Ciechanover (Israel) – Avram Hershko – Irwin Rose (Mĩ)	Được trao giải cho công trình về cách thức các tế bào phân huỷ
2003	- Peter Agre (Mĩ) -- Roderick Mac Kinnon (Mĩ)	Được trao giải cho nghiên cứu về cách thức các chất chủ chốt tiến vào hoặc rời khỏi các tế bào trong cơ thể, và khám phá của họ liên quan tới các lỗ nhỏ, được gọi là "kênh" trên bề mặt tế bào
2002	– John B.Fenn (Mĩ) - Koichi Tanaka (Nhật) – Kurt Wuthrich (Thuy Sĩ)	Được trao giải vì đã phát hiện ra các cách thức dùng trong nhận diện và phân tích các phân tử sinh học lớn
2001	– William Standish Knowles (Mĩ) – Alan. G. Mac Diarmid (Mĩ) – K. Bary Sharpless (Mĩ)	Được trao giải cho công trình về cách kiểm soát tốt hơn các phản ứng hoá học, mở đường cho các loại dược phẩm trị bệnh tim và bệnh Parkinson
2000	Alan. J. Heeger (Mĩ) – Ryoji Novori (Nhật) –K. Barry Shirakawa (Nhật)	Được trao giải cho phát minh mang tính cách mạng trong lĩnh vực sản xuất các chất dẻo có thể dẫn điện và kích thích sự phát triển nhanh chóng của điện tử học phân tử

Thập niên 1990

Năm	Tên	Đóng góp về
1999	Admed Zewail (Mĩ)	Được trao giải vì đã tiên phong điều tra nghiên cứu các phản ứng hoá học cơ bản, sử dụng tia laser cực ngắn, trên thang thời gian mà các phản ứng thường xảy ra
1998	Walter Kohn (Mĩ – Áo)	Được trao giải cho nghiên cứu phát triển lí thuyết mật độ – chức năng
	John Pople (Anh)	Được trao giải thưởng cho nghiên cứu phát triển các phương pháp trong hoá học lượng tử
1997	– Paul D Boyer (Mĩ) – John F. Walker (Anh) – Jens Christian Skou (Đan Mạch)	Được trao giải cho công trình nghiên cứu cách thức các tế bào cơ thể lưu trữ về truyền năng lượng
1996	– Robert F. Curl Jr (Mĩ) – Sir Harold Kroto (Anh) – F. Sherwood Rowland (Mĩ)	Được trao giải do khám phá ra một loại phân tử cacbon mới gọi là fullerene mà cấu trúc phân tử giống như một quả bóng đá (C_{60})
1995	– Paul J. Crutzen (Hà Lan) – Mario J. Molina (Mĩ – Mexico) – F. Sherwood Rowland (Mĩ)	Được trao giải cho công trình nghiên cứu sự hình thành và phân huỷ tầng ozon
1994	George A. Olah (Mĩ – Hungari)	Được trao giải cho những đóng góp của ông trong ngành hoá cacbon cation
1993	– Kary B. Mullis (Mĩ) – Michael Smith (Canada – Ams)	Được trao giải thưởng cho nghiên cứu phát triển hai phương pháp mới mang lại sự tiến bộ quyết định trong công nghệ gen
1992	Rudolph A.Marcus (Mĩ – Canada)	Được trao giải vì đóng góp của ông về giả thuyết các phản ứng truyền điện trong các hệ thống hoá học
1991	Richard. R. Ernst (Thuỵ Sĩ)	Được trao giải vì những đóng góp cho sự phát triển phổ cộng hưởng từ hạt nhân độ phân giải cao (NMR)
1990	Elias James Corey (Mĩ)	Được trao giải cho sự phát triển giả thuyết và phương pháp luận của tổng hợp hữu cơ

Năm	Tên	Đóng góp về
1989	– Sidney Altman (Mĩ) – Thomas. R. Cech (Mĩ)	Được trao giải cho công trình chứng minh một cách độc lập rằng RNA (axit ribonucleic) còn có thể trợ giúp tích cực cho các phản ứng hoá học
1988	– Johann Deseinhofer (Đức) – Robert Huber (Đức) – Hartmut Michel (Đức)	Được trao giải vì đã xác định được cấu trúc của các protein nhất định cần trong quang hợp
1987	– Donald. J. Cram (Mĩ) – Jean Marie Lehn (Pháp) – Charles. J. Pedersen (Mĩ)	Được trao giải cho nghiên cứu tổng hợp các phân tử có thể bắt chước các phản ứng sinh học quan trọng
1986	– Dudley R. Herschbach (Mĩ) – Lý - Viễn – Triết (Mĩ) – J. C. Polanyi (Mĩ)	Được trao giải cho công trình nghiên cứu chứng tỏ cách thức các phản ứng hoá học cơ bản diễn ra
1985	– Herbert A. Hauptman (Mĩ) – Jerome Karle (Mĩ)	Được trao giải cho nghiên cứu phát triển các phương pháp xác định cấu trúc phân tử của pha lê
1984	Robert Bruce Merrifield (Mĩ)	Được trao giải cho công trình phát triển phương pháp luận cho tổng hợp hoá học trên nền rắn
1983	Henry Taube (Mĩ)	Được trao giải cho công trình giải thích phản ứng hoá học trong mọi vật, từ quang hợp ở thực vật cho tới pin và pin nhiên liệu
1982	Aaron Klyg (Anh)	Được trao giải thưởng cho công trình nghiên cứu về cấu trúc gen
1981	Kenechi Fukui (Nhật) Roald Hoffmann (Mĩ)	Được trao giải cho công trình nghiên cứu về hoá học lí thuyết trong việc thúc đẩy tiến trình của các phản ứng hoá học
1980	Walter Gilbert (Mĩ) Frederic Sanger (Anh)	Được trao giải cho những đóng góp liên quan đến chuỗi axit nucleic
	Paul Berg (Mĩ)	Được trao giải thưởng cho các nghiên cứu cơ bản về hoá sinh của axit nucleic

Thập niên 1970

Năm	Tên	Đóng góp về
1979	– Harbert. C. Brown (Mĩ) – Georg Wittig (Đức)	Đã có công triển khai các hợp chất của bo và photpho trong các tổng hợp hữu cơ quan trọng
1978	Peter. D. Mitchell (Anh)	Đã đóng góp công sức vào sự hiểu biết các di chuyển năng lượng trong sinh học nhờ công thức hoá lí thuyết về thẩm thấu
1977	Ilya Prigogine (Mĩ – Nga)	Do sự đóng góp vào nhiệt động học các hệ không cân bằng và lí thuyết các cấu trúc
1976	Willuan Nunn Lipscomb (Mĩ)	Do những công trình về cấu trúc của các boran, giúp soi sáng các vấn đề về liên kết hoá học
1975	John Comforth (Anh)	Được trao giải với các công trình về hoá học lập thể của các phản ứng giữa các enzim
	Vladimir Prelog (Thuy Sĩ)	Do những công trình về hoá học lập thể của các phân tử và các phản ứng hữu cơ
1974	Paul J Flory (Mĩ)	Do những kết quả về lí thuyết và thực nghiệm trong hoá lí các đại phân tử
1973	Ernst Otto Fischer (Đức) Geoffrey Wilkinson (Anh)	Do những công trình tiên phong tiến hành độc lập với nhau về hoá học các chất cơ kim mang tên "hợp chất bánh kẹp"
1972	Chistian B. Anfinsen (Mĩ)	Do các công trình về ribonuclease đặc biệt là mối quan hệ giữa chuỗi của các amino axit và cấu dạng hoạt động sinh học
	Stanford Moore (Mĩ)	Đã đóng góp vào sự hiểu biết về mối liên hệ giữa cấu trúc hoá học và sự hoạt động xúc tác của trung tâm hoạt động của phân tử ribonuclease
1971	Gerhard Herzberg (Canada – Đức)	Đã góp phần vào sự hiểu biết cấu trúc điện tử và hình học của các phân tử và đặc biệt các gốc tự do
1970	Luis Federico Leloir (Argentina)	Do sự khám phá ra các đường nucleotic và vai trò của chúng trong sinh tổng hợp những cacbohiđrat

Thập niên 1960

Năm	Tên	Đóng góp về
1969	Derek Harold Richard Barton (Anh) Odd Hassel (Na Uy)	Đã góp phần vào sự phát triển khái niệm đối chứng và ứng dụng khái niệm này vào hoá học
1968	Lurs Onsager (Mĩ – Nauy)	Đã tìm ra mối quan hệ qua lại mang tên tác giả và rất cơ bản đối với những phản ứng nhiệt động không thuận nghịch
1967	Manfred Eigen (Đức) W. Norrish (Anh) và G. Porter (Anh)	Do các công trình về những phản ứng cực nhanh thực hiện bằng cách gây nhiễu loạn cân bằng phản ứng nhờ những xung động năng lượng rất ngắn
1966	R.S.Mulliken (Mĩ)	Do các công trình cơ bản về liên kết hoá học và cấu trúc điện tử của các phân tử bằng phương pháp "obitan phân tử"
1965	R. Burns Woodward (Mĩ)	Do những kết quả nổi bật trong tổng hợp hữu cơ. Ông cùng các nhà nghiên cứu khác tổng hợp được cortidon, kinin ...
1964	Dorothy Crowfoot Hogkin (Anh)	Do xác định được cấu trúc của những chất sinh hoá quan trọng bằng kĩ thuật tia X
1963	Karl Ziegler (Đức) Giulio Natta (Italia)	Do có những khám phá đột xuất trong lĩnh vực hoá học và kĩ thuật học các cao phân tử
1962	M.F. Perutz (Anh) J.C.Kendrew (Anh)	Do các công trình về cấu trúc của các protein hình cầu
1961	Melvin Calvin (Mĩ)	Do các công trình về đồng hoá khí CO_2 bởi thực vật
1960	W.F.Libby (Mĩ)	Do phát minh ra phương pháp dùng C – 14 để xác định niên đại các đối tượng nghiên cứu trong khảo cổ, địa chất, địa vật lí v.v...

Thập niên 1950

Năm	Tên	Đóng góp về
1959	J. Heyrovsky (Sec)	Do sự khám phá và triển khai các phương pháp phân tích bằng chụp ảnh phân cực
1958	F. Sanger (Anh)	Do những công trình về cấu trúc của các protein đặc biệt là cấu trúc của insulin
1957	A.R.Todd (Anh)	Do những công trình nghiên cứu về các nucleotide
1956	N. Hinshelwood (Anh) N.N. Semionov (Liên Xô)	Do những nghiên cứu về các cơ chế của những phản ứng hoá học trong đó có lí thuyết về các phản ứng dây chuyền
1955	V. Vigneaud (Mĩ)	Do những công trình về các hợp chất chứa S trong sinh hoá, đặc biệt sự tổng hợp đầu tiên một hormon polipeptid
1954	L. Pauling (Mĩ)	Do những nghiên cứu về bản chất của liên kết hoá học và những áp dụng vào việc xác định cấu trúc của các phức chất
1953	H. Staudinger (Đức)	Do những khám phá trong lĩnh vực hoá học các chất cao phân tử (quá trình trùng hợp và việc tổng hợp các chất dẻo)
1952	A.J.P. Martin (Anh) R.L.M Synge (Scotland)	Đã khám phá ra phương pháp chụp ảnh màu để phân chia (là phương pháp tách các cấu phần của một hỗn hợp căn cứ vào sự hấp phụ có chọn lọc của chúng)
1951	E.M. Mc Millan (Mĩ) G.T. Seaborg (Mĩ)	Do các công trình tổng hợp một số nguyên tố siêu uran
1950	Otto Diels (Đức) Kurt Alder (Đức)	Do đã phát minh và phát triển phương pháp tổng hợp diemic (cacbua hiđro hai lần etilen)

Thập niên 1940

Năm	Tên	Đóng góp về
1949	M.F. Giauque	Do sự đóng góp trong lĩnh vực nhiệt động học hoá học, đặc biệt về sự ứng xử của các chất ở nhiệt độ cực kì thấp
1948	A.W.K.Tiselius (Thuỵ Sĩ)	Do những nghiên cứu về điện di và sự phân tích bằng hấp phụ, đặc biệt đây là những phát minh có liên quan đến bản chất phức tạp của các protein, các huyết thanh
1947	S.R.Robinson (Anh)	Do những nghiên cứu về các sản phẩm thực vật có tầm quan trọng về mặt sinh học, đặc biệt là các alcaloid
1946	J.B.Summer (Mĩ) J.H.Nothrop (Mĩ) W.M.Stanley (Mĩ)	Do phát minh ra sự kết tinh của các enzim. Do đã điều chế được các enzim và những virut ở trạng thái nguyên chất
1945	A.J. Virtanen (Phần Lan)	Do các nghiên cứu về hoá nông và hoá dinh dưỡng, đặc biệt là phương pháp bảo quản rơm rạ
1944	Otto Hahn (Đức)	Do sự khám phá ra hiện tượng phân rã hạt nhân nguyên tử nặng. Đã thực hiện thành công sự phân rã của U – 235 bằng cách bắn phá bằng các nơtron chậm, tạo thành phản ứng dây chuyền. Là cơ sở để khai thác năng lượng nguyên tử
1943	G. Hervesy (Hungary)	Do các công trình về sử dụng các chất đồng vị làm nguyên tử đánh dấu trong việc nghiên cứu các quá trình hoá học
1942 1941 1940	Không trao giải	

Thập niên 1930

Năm	Tên	Đóng góp về
1939	A. B. Butenandt (Đức) L. Ruzicka (Thuy Sĩ)	Do những nghiên cứu về hormon giới tính. Do những công trình về polimetylen và các tecpen bậc cao Ông và Butenandt đã tổng hợp được testosteron, oestradion và progesteron
1938	R. Kuhn (Đức)	Do những nghiên cứu về các carotene và các vitamin. Kuln và Karrer tổng hợp thành công vitamin B_2 hay là riboflavin
1937	W.N. Haworth (Aul) P. Karerr (Thuy Sĩ)	Do những nghiên cứu về những cacbohidrat và vitamin C. Do những nghiên cứu về các carotenoit, các flavin, các vitamin A và B_2
1936	P. Debye (Hà Lan)	Do các công trình về cấu tạo của các phân tử căn cứ vào momen lưỡng cực và sự khuếch tán của tia X. Công bố lí thuyết Debye – Huckel
1935	F. Joliot Curie (Pháp) và vợ là Irene Joliot Curie (Pháp) (Joliot và Irene là con rể và con gái của ông bà Pierre và Marie Curie	Do đã khám phá ra sự phóng xạ tự nhiên và tổng hợp được những nguyên tố phóng xạ mới
1934	H.C. Urey (Mĩ)	Do đã khám phá ra đoteri, mở đường cho việc nhận dạng và tách nhiều chất đồng vị
1933	Không trao giải	
1932	I. Lang mur (Mĩ)	Do phát hiện và nghiên cứu về hoá học các bề mặt
1931	K. Bosch (Đức) F. Bergius (Đức)	Do sự đóng góp trong việc sáng tạo và phát triển các phương pháp hoá học dưới áp suất cao (đặc biệt trong việc tổng hợp khí amoniac)
1930	Hans Fischer (Đức)	Do những nghiên cứu về thành phần của hematin, của chlorophyl và việc tổng hợp hematin

Thập niên 1920

Năm	Tên	Đóng góp về
1929	A. Harden (Anh) H. Von Euler Chelpin (Thuy Điển)	Do có những nghiên cứu về sự lên men của đường và về các enzim của sự lên men
1928	A. Windaus (Đức)	Do những nghiên cứu về thành phần các sterol và sự liên quan của chúng với các vitamin
1926	Th. Sverdberg (Thuy Điển)	Do những công trình về hệ phân tán. Những công trình về chuyển động Brown phần lớn là của Sverdberg
1925	R.A.Zsigmondy (Đức – Áo)	Do chứng minh được bản chất dị thể của các dung dịch keo và xây dựng các phương pháp cơ bản trong hoá học chất keo
1924	Không trao giải	
1923	F. Pregl (Áo)	Do xây dựng được phương pháp vi phân tích các chất hữu cơ
1922	F.W. Aston (Anh)	Đã sáng chế ra khối phổ ký và nhờ vậy đã xác định được dễ dàng một số lớn đồng vị của những nguyên tố không phóng xạ và nêu lên quy tắc về hao hụt khối lượng
1921	F. Soddy (Anh)	Do sự đóng góp cho sự hiểu biết về các chất phóng xạ và những nghiên cứu về nguồn gốc, bản chất của các chất đồng vị Đã đề xuất định luật phóng xạ
1920	W. H. Nernst (Đức)	Do những công trình về nhiệt hoá học đã tạo dựng được thuyết về sức điện động của các pin

Thập niên 1910

Năm	Tên	Đóng góp về
1919	Không trao giải	
1918	Fritz Haber (Đức)	Do tổng hợp được amoniac từ các nguyên tố cấu thành (N_2 và H_2). Nhờ sáng chế này mà có sự phát triển kì diệu công nghiệp amoniac, axit nitric và các nitrat
1917 1916	Không trao giải	
1915	R. Willstatter (Đức)	Do những nghiên cứu về sắc tố thực vật, đặc biệt chất chlorophyl
1914	Th.W.Richards (Anh)	Do xác định được chính xác khối lượng nguyên tử của một số lớn nguyên tố hoá học
1913	A. Werner (Thuỵ Sĩ – Đức)	Do những công trình về liên kết các nguyên tử trong phân tử đặc biệt là trong các phức chất
1912	V. Grignard (Pháp) P. Sabatier (Pháp)	Do phương pháp hidro hoá các hợp chất hữu cơ với sự có mặt của các kim loại ở dạng phân tán cực nhỏ đã giúp cho hoá học hữu cơ có những bước tiến mạnh mẽ
1911	Marie Curie (Ba Lan – Pháp)	Do sự khám phá ra hai nguyên tố radi và poloni, tách radi và nghiên cứu bản chất của các hợp chất của nguyên tố kì lạ đó. Những công trình nghiên cứu của bà và chồng là Pierre Curie cùng với Becquerel và Carl Schmidt là nguồn gốc của sự ra đời và phát triển vĩ đại của hoá học hạt nhân
1910	Otto Wallach (Đức)	Được trao giải để ghi nhận những đóng góp của ông trong việc phát triển ngành hoá hữu cơ và công nghiệp hoá học bằng những nghiên cứu tiên phong trong lĩnh vực các hợp chất alicyclic

Thập niên 1900

Năm	Tên	Đóng góp về
1909	W. Ostwald (Đức)	Được trao giải vì những công trình nghiên cứu của ông về sự cân bằng hoá học và vận tốc phản ứng hoá học
1908	E. Rutherford (Anh)	Được trao giải vì những nghiên cứu của ông về sự phân rã các nguyên tố và hoá học các chất phóng xạ
1907	E. Buchner (Đức)	Được trao giải vì những công trình nghiên cứu của ông trong ngành hoá sinh và cho sự khám phá của ông về sự lên men không cần tế bào
1906	Henri Moisan (Pháp)	Được trao giải vì đã nghiên cứu và cô lập được chất flo, cũng như phát minh ra các lò điện phục vụ cho khoa học
1905	A. Von Baeyer (Đức)	Được trao giải vì đã có công phát triển ngành hoá hữu cơ và công nghiệp hoá học qua các công trình nghiên cứu của ông về thuốc nhuộm hữu cơ và hidrocacbon thơm.
1904	W.Ramsay (Anh)	Được trao giải vì đã phát hiện ra các khí hiếm trong không khí và xác định vị trí của chúng trong hệ thống tuần hoàn
1903	S. Arrhenius (Thuỵ Điển)	Được trao giải vì đã xây dựng được thuyết điện li
1902	H.E. Fischer (Đức)	Được trao giải vì những nghiên cứu của ông về sự tổng hợp các nhóm đường và purine
1901	J.H. Van't Hoff (Hà Lan)	Được trao giải vì đã khám phá ra các định luật về động lực hoá học và áp suất thẩm thấu trong các dung dịch

Chịu trách nhiệm xuất bản :
Chủ tịch HĐQT kiêm Tổng Giám đốc NGÔ TRẦN ÁI
Phó Tổng Giám đốc kiêm Tổng biên tập NGUYỄN QUÝ THAO

Tổ chức bản thảo và chịu trách nhiệm nội dung :
Phó Tổng biên tập NGÔ ÁNH TUYẾT
Giám đốc Nhà xuất bản Giáo dục tại TP. Hà Nội NGUYỄN MINH KHANG

Biên tập nội dung :
PHÙNG THỊ PHƯƠNG LIÊN
Thiết kế sách và vẽ hình :
TẠ THANH TÙNG - VŨ HOÀNG DŨNG
Trình bày bìa :
TẠ THANH TÙNG
Sửa bản in :
TRẦN LỆ KIỀU HOA
Chế bản :
CÔNG TY CP MĨ THUẬT VÀ TRUYỀN THÔNG

ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN VÀ HỆ THỐNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC
Mã số : 8I922A0

In 1.000 cuốn, khổ 19x27cm, tại Công ty CP In Công Đoàn Việt Nam, 167 Tây Sơn, Đống Đa, Hà Nội. Số in: 1631. Số xuất bản: 394-2010/CXB/17-568/GD. In xong và nộp lưu chiểu tháng 1 năm 2011.

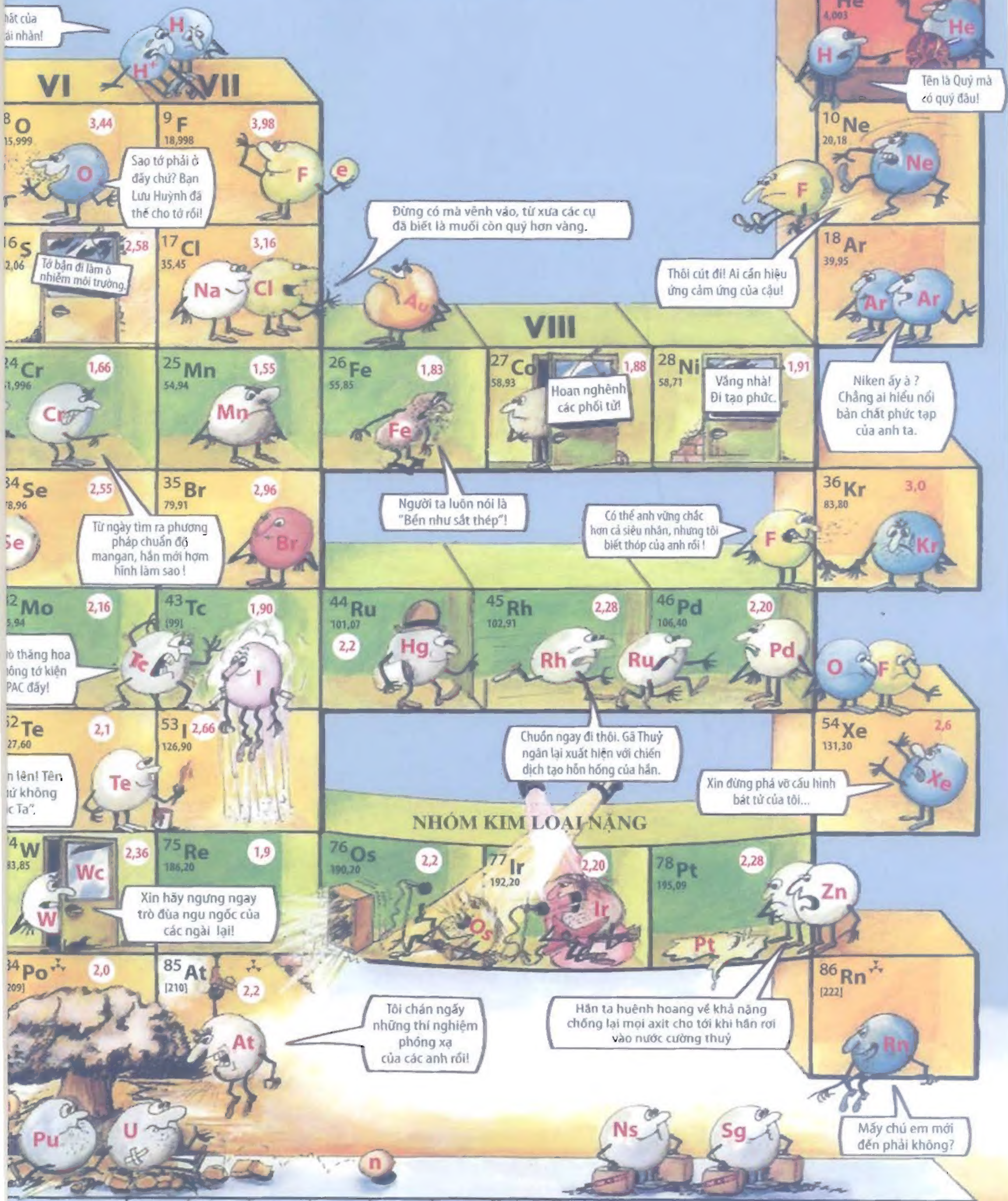
BẢNG TUẦN HOÀN CÁC NGUY

CHU KÌ	I	II	III	IV	V
1	1 H 2,20 1,008				
2	3 Li 0,98 6,94	4 Be 1,57 9,01	5 B 2,04 10,81	6 C 2,55 12,01	7 N 3,04 14,007
3	11 Na 0,93 22,989	12 Mg 1,31 24,31	13 Al 1,61 26,98	14 Si 1,90 28,09	15 P 2,19 30,97
4	19 K 0,82 39,10	20 Ca 1,00 40,08	21 Sc 1,36 44,96	22 Ti 1,54 47,90	23 V 1,63 50,94
	29 Cu 1,90 63,54	30 Zn 1,65 65,41	31 Ga 1,81 69,72	32 Ge 2,01 72,64	33 As 2,18 74,92
5	37 Rb 0,82 85,47	38 Sr 0,95 87,62	39 Y 1,22 88,91	40 Zr 1,33 91,22	41 Nb 1,6 92,91
	47 Ag 1,93 107,87	48 Cd 1,69 112,41	49 In 1,78 114,82	50 Sn 1,96 118,69	51 Sb 2,05 121,75
6	55 Cs 0,79 132,91	56 Ba 0,89 137,31	57 La 1,1 138,91	72 Hf 1,3 178,49	73 Ta 1,5 180,95
	79 Au 2,54 196,97	80 Hg 2,00 200,59	81 Tl 1,62 204,37	82 Pb 2,33 207,20	83 Bi 2,02 208,98
7	87 Fr 0,7 [223]	88 Ra 0,9 226,03	89 Ac 1,1 227		

2,2 Độ âm điện theo Pauling

Nguyên tố không có đồng vị bền

ÊN TỐ HOÁ HỌC (HOÁ HỌC VUI)



Họ Lantan	58 Ce 140,12	59 Pr 140,91	60 Nd 144,24	61 Pm [147]	62 Sm 150,35	63 Eu 151,96	64 Gd 157,25	65 Tb 158,93	66 Dy 162,50	67 Ho 164,93	68 Er 167,26	69 Tm 168,93	70 Yb 173,04	71 Lu 174,97
Họ Actini	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99	100	101 Md	102	103



VƯƠNG MIỆN KIM CƯƠNG
CHẤT LƯỢNG QUỐC TẾ





Giá : 200 000đ